



TITLE:

$S=1/2$ Heisenberg梯子模型の密度行列繰り込み群による研究

AUTHOR(S):

成島, 毅

CITATION:

成島, 毅. $S=1/2$ Heisenberg梯子模型の密度行列繰り込み群による研究. 物性研究 1998, 69(5): 702-741

ISSUE DATE:

1998-02-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/96250>

RIGHT:

$S = 1/2$ Heisenberg 梯子模型の 密度行列繰り込み群による研究*

筑波大学物理学研究科 成島 毅†

(1997 年 11 月 25 日受理)

Abstract

Haldane が 1983 年に、反強磁性 Heisenberg 鎖の基底状態について整数スピンと半奇整数スピンとは定性的に異なり、半奇整数スピンでは励起にギャップがないが整数スピンではギャップ (Haldane ギャップ) が存在すると主張して以来、 $S = 1$ 反強磁性 Heisenberg 鎖は理論・実験両面で盛んに研究されてきた。

交換相互作用 $J(> 0)$ の 2 本の $S = 1/2$ 反強磁性 Heisenberg 鎖を鎖間相互作用 $-\lambda J$ でつないだ $S = 1/2$ Heisenberg 梯子模型は $S = 1/2$ ($\lambda = 0$) と $S = 1$ ($\lambda \rightarrow \infty$) の反強磁性 Heisenberg 鎖のクロス・オーバーがみられるため、Haldane 状態の理解に関連して興味を持たれている。特に無限小の鎖間相互作用で $S = 1$ の Haldane ギャップと本質的に同等なエネルギー・ギャップを持つ相 (Haldane 相) が実現されているかが調べられてきたが、プロジェクト・モンテカルロ法や厳密対角化を用いたこれまでの数値的な研究では系のサイズが小さすぎるため、無限系への外挿の際の誤差が大きく明確な結論が得られていない。一方、最近 White により提案された密度行列繰り込み群の方法は大きな系の低励起状態を精度よく求められると期待されている。そこで、この方法によりギャップや相関長の臨界的性質を求めてみた。

その結果、鎖間相互作用 $-\lambda J$ が非常に小さい領域まで Haldane 相が続いており、鎖内に 1 軸性の異方性 Δ を入れ、これを等方点 $\Delta = 1$ より少し小さくしたときにも、強磁性的な鎖間相互作用が少しでも入れば Haldane 相に転移することを示唆する結果を得た。転移は Kosterlitz-Thouless 的ではなく 2 次転移のようである。また $\lambda = 1$ のときの Haldane 相と反強磁性相の間の相転移も調べ、転移点 $\Delta_c \approx 1.15$ を得た。さらに、以上より推察される Δ - λ の相図を提案した。

* 1994 年度 修士論文

† 1995 年 4 月より花王株式会社 包材・加工技術研究所

目 次

1 序論	704
1.1 はじめに	704
1.2 1次元量子スピン系と Haldane 予想	704
1.3 Edge Effect と隠れた反強磁性秩序	705
1.4 Kennedy-Tasaki 変換	707
2 密度行列繰り込み群	709
2.1 数値繰り込み群の従来の方法	709
2.2 密度行列による定式化	711
2.3 密度行列繰り込み群	713
2.3.1 Infinite System Method	713
2.3.2 Finite System Method	715
2.3.3 周期的境界条件への応用	717
2.3.4 物理量の計算法	718
2.4 密度行列繰り込み群の2次元への拡張	720
3 量子梯子模型	722
3.1 梯子型化合物 $(\text{VO})_2\text{P}_2\text{O}_7$, $\text{Sr}_{n-1}\text{Cu}_{n+1}\text{O}_{2n}$	722
3.2 量子梯子模型	724
3.3 $S=1/2$ Heisenberg 梯子模型	726
3.4 密度行列繰り込み群による研究	730
3.4.1 Edge Effect	730
3.4.2 Haldane ギャップと相関長	731
3.4.3 基底状態の相図	737
4 結論	739

1 序論

1.1 はじめに

1次元量子スピン系は量子多体系のなかでも最も簡単なモデルとして古くから研究されてきた。特に $S = 1$ の系で Haldane ギャップがみつかった以来、1次元量子スピン系は精力的に研究されている。本論文で取り上げる2本の $S = 1/2$ XXZ 鎖からなる $S = 1/2$ Heisenberg 梯子模型は鎖間相互作用が強磁性的なとき、 $S = 1/2$ と $S = 1$ の XXZ 鎖を内挿するモデルであり、Haldane 状態の理解に関連して興味を持たれている。

まず1章で序論として1次元量子スピン系のレビューを行い、Haldane 状態を特徴づける隠れた反強磁性秩序と、有限系に現れる $S = 1/2$ の edge spin や基底状態の4重縮退について解説する。2章では White により提案された密度行列繰り込み群の方法を詳細に説明する。3章で梯子模型に関係する問題のレビューと密度行列繰り込み群を用いて得られた結果を紹介し、最後に4章で総括を行う。

1.2 1次元量子スピン系と Haldane 予想

1次元 Heisenberg 模型の Hamiltonian は次のように表される。

$$H = J \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} \quad (1.1)$$

スピンの大きさ S は $S = 1/2, 1, 3/2, \dots$ をとる。 $J < 0$ のとき強磁性相互作用、 $J > 0$ のとき反強磁性相互作用と呼ぶ。スピンを単なる長さ1のベクトルとみなす古典スピン系では、この系の基底状態は明らかである。 $J < 0$ のときはすべてのスピンの同じ方向を向いた強磁性状態が基底状態であり、 $J > 0$ のときは2つの部分格子に分かれる格子では、スピンの隣同士反対の方向を向いた反強磁性状態 (Néel 状態) が基底状態である。

ところが(1.1)式を量子力学的に取り扱おうとすると途端に問題が難しくなる。 $J < 0$ のときは量子的な場合にも古典的な強磁性秩序が基底状態であるが、 $J > 0$ のときには Néel 状態はもはや Hamiltonian (1.1) の固有状態でない。例えば $S = 1/2$ のとき、簡単な場合として2サイトの系を考えると固有状態は

$$\begin{array}{ll} \text{triplet} & \frac{1}{4}J, \quad \begin{cases} |\uparrow\uparrow\rangle, & S_{\text{tot}} = 1, \quad S_{\text{tot}}^z = 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle), & S_{\text{tot}} = 1, \quad S_{\text{tot}}^z = 0 \\ |\downarrow\downarrow\rangle, & S_{\text{tot}} = 1, \quad S_{\text{tot}}^z = -1 \end{cases} \\ \text{singlet} & -\frac{3}{4}J, \quad \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle), \quad S_{\text{tot}} = 0, \quad S_{\text{tot}}^z = 0 \end{array}$$

の4通りある。ここで S_{tot} は全スピンの量子数で S_{tot}^z は全スピンの z 成分の量子数である。 $J < 0$ のときは古典的な場合と同じくスピンの向きの揃った $|\uparrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle$ という状態も基底状態であるが、 $J > 0$ の場合は基底状態は singlet であり、Néel 状態に対応する $|\uparrow\downarrow\rangle$ や $|\downarrow\uparrow\rangle$ はもはや固有状態でなくエネルギー期待値も $-J/4$ で、singlet のときのエネルギー



図 1.1: 1 次元鎖のダイマー状態。実線は singlet ボンドを表す。

固有値 $-3J/4$ よりも大きい。一般に 1 次元の多体系のときも状況は変わらない。例えば Néel 状態では 1 つのボンドあたりのエネルギーは $-J/4$ であるが、仮に図 1.1 のように単純に singlet ボンドを交互に並べたダイマー状態をつくるだけでもボンドあたりのエネルギーは平均して $-3J/8$ となり、Néel 状態よりエネルギーの低い状態がつかれる。

$S = 1/2$ の 1 次元鎖の基底状態の描像として Anderson による RVB (resonating valence bond) の考え方がある。RVB 状態とは図 1.1 を含む様々な singlet pair 状態を

$$|\psi\rangle = \sum_a |\psi_a\rangle$$

$$|\psi_a\rangle = \prod_{ij} h(i-j)(ij), \quad (ij) = \frac{|\uparrow_i \downarrow_j\rangle - |\downarrow_i \uparrow_j\rangle}{\sqrt{2}}$$

のように線形結合させたものである。ここで $|\psi_a\rangle$ は singlet pair 状態のうちの 1 つで、singlet pair (ij) は最近接だけでなく離れた位置のものも考える。 $h(i-j)$ は 2 つのスピンの距離の関数で、ベキ的に減少するとき長距離 RVB、指数関数的に減少するとき短距離 RVB と呼ぶ。有限系ではこのような長距離 RVB 描像で良く近似できることが確認されている。

以上のように量子効果が入ったときの Hamiltonian (1.1) の基底状態は非常に難しくなるが、 $S = 1/2$ のときは Bethe により厳密に解かれている。それによると $S = 1/2$ Heisenberg 鎖の基底状態と励起状態の間はギャップレスでスピン相関は振動しながらベキ的に減衰する、反強磁性秩序に近い臨界的な状態であることが分かっている。一方、2 次相転移の理論によるとスピン系の臨界的な性質はスピンの大きさにはよらないため、 $S = 1/2$ の基底状態の性質は他の任意の S でも同様とされていた。

ところが 1983 年になって、Haldane はスピンの大きさが $1/2, 3/2, 5/2, \dots$ などの半奇整数のときと $1, 2, 3, \dots$ などの整数のときとは基底状態が定性的に異なるという予想をした (Haldane 予想)。スピンが半奇整数のときは基底状態は $S = 1/2$ のときと同じ性質であるが、整数のときは基底状態からの励起にギャップがあり、スピン相関関数は指数関数的に減衰すると主張したのである。つまり整数スピンの系では異常に強い量子ゆらぎがあり、系のスピンは無秩序な状態であると主張している。

以後、整数スピン、特に $S = 1$ に特有の励起のギャップと基底状態をそれぞれ Haldane ギャップ、Haldane 状態と呼ぶことにする。

1.3 Edge Effect と隠れた反強磁性秩序

Haldane 予想はもともと $S \rightarrow \infty$ の解析によるものであり近似を多用した難解な議論であったため当時の理論家にはすぐには受け入れられなかったが、その後の多くの計算機実

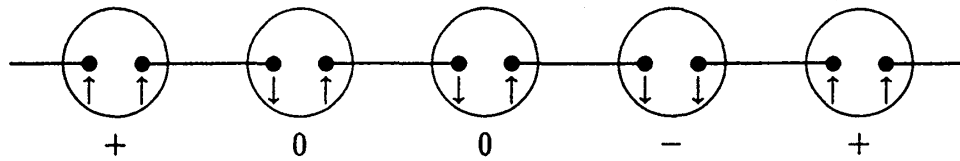


図 1.2: VBS 状態の模式図。黒点は $S = 1/2$ のスピンである。2つの点を囲む丸は $S = 1/2$ のスピンの対称化を表す。 $S = 1/2$ のスピンは互いに singlet ボンドで結ばれている。

験により今日では広く信じられている。いままでのところ Hamiltonian (1.1) での Haldane 予想の厳密な証明はないが, Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki [2] によりそれに類似した回転対称かつ並進対称の $S = 1$ の Hamiltonian (AKLT モデル)

$$H = \sum_i \left[\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} + \frac{1}{3} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1})^2 \right] \quad (1.2)$$

でエネルギー励起のギャップとスピン相関関数の指数関数的な減衰が厳密に示された。

実は AKLT モデルの基底状態は厳密に書き下せる。この基底状態は VBS (Valence Bond Solid) 状態と呼ばれている (図 1.2)。VBS 状態は以下のようにしてつくる。まず $S = 1$ のスピンを 2つの $S = 1/2$ のスピんでつくる。このためには $S = 1/2$ のスピンを triplet に対称化すればよい。これを 1次元に配置し、 $S = 1/2$ のサイトを互いに singlet ボンドで結ぶ。この singlet ボンドを valence bond と呼ぶ。

VBS 状態が AKLT モデルの基底状態になるのは (1.2) 式が

$$H = \sum_i \left(2P_{i,i+1}^{S=2} - \frac{2}{3} \right)$$

と書き直せるからである。 $P_{i,i+1}^{S=2}$ はサイト $i, i+1$ のスピンの合計が 2 になる空間への射影演算子である。VBS 状態ではサイト $i, i+1$ にある 4つの $S = 1/2$ スピンのうち 2つは singlet を組んでいるためスピンは高々 1 にしかなれない。従って VBS 状態は $P_{i,i+1}^{S=2}$ の固有値 0 の固有状態で、AKLT モデルの基底状態になる。

VBS 状態では、有限系で境界が open のとき、基底状態に疑似 4 重縮退がある。これは鎖の両端の $S = 1/2$ のスピンのダイマーを組まずに余ってしまうからである。もちろん両端の $S = 1/2$ スピンも同じ格子上のもう 1つの $S = 1/2$ スピンと対称化されなければならないため、完全に両端の格子点に局在しているわけではないがその影響は指数関数的に減少し、鎖端にスピン $1/2$ が局在する。

VBS 状態は S^z の基底で展開すると面白い性質が見えてくる。例えば図 1.2 で左端のスピンが \uparrow であるとする。右隣は triplet に対称化されているので \uparrow か \downarrow のどちらかになるが、ここでは例えば \uparrow とする。その右隣とは singlet で結ばれているため必ず反対向きのスピンとなり \downarrow になる。このようにしてスピンを並べていった項のうちの 1つを図示したのが図 1.2 である。もとの $S = 1$ の系に戻ると $+00-+000-0+0$ といった配位になる。つまり VBS 状態は $+$ と $-$ の間に 0 がいくつか入るがそれを除くと $+-+-+-$ といった反強磁性秩序が現れる、隠れた反強磁性秩序を持っていることが分かる。

隠れた反強磁性秩序を特徴づける秩序変数として、次式で定義されるストリングオーダー・パラメーターがある [3, 4]。

$$O_{\text{str}}^\alpha = - \lim_{|i-j| \rightarrow \infty} \left\langle S_i^\alpha \exp \left(i\pi \sum_{l=i+1}^{j-1} S_l^\alpha \right) S_j^\alpha \right\rangle, \quad \alpha = x, y, z \quad (1.3)$$

ここで $\langle \dots \rangle$ は基底状態での平均を表す。 $\exp(i\pi \sum_{l=i+1}^{j-1} S_l^\alpha)$ は、 S_i と S_j の間のスピン S_l を見ていったときに $+$ または $-$ が現れたらその都度、符号を反転させることを意味しており、特に VBS 状態では任意の i, j 間で $O_{\text{str}}^\alpha = 4/9$ である。

以上のような基底状態の性質は Hamiltonian (1.1) でも成り立つ。Kennedy は数値対角化により、偶数 (奇数) の長さの系で singlet (triplet) の基底状態と triplet (singlet) の第 1 励起状態の間のエネルギー・ギャップ E_{gap} が長さ L とともに $E_{\text{gap}} \propto e^{-L/\xi}$ に従って指数関数的に減少することを見出した [10]。この式より評価した逆相関長 ξ^{-1} は無限系のエネルギー・ギャップに比例すると考えられている。彼らは一般に Hamiltonian

$$H = \sum_i [S_i \cdot S_{i+1} - \beta (S_i \cdot S_{i+1})^2]$$

において、 $\beta \neq 0$ の領域でも同様に逆相関長 ξ^{-1} を評価し、 $\beta = -1/3$ と $\beta = 0$ が同じ universality class に属していることを示した。

Hamiltonian (1.1) の直接の数値的な研究から、鎖の両端の edge spin が見い出されている [11, 12]。またストリングオーダーも VBS 状態での $4/9$ より小さいが、有限の値が得られている ($O_{\text{str}} \approx 0.374$) [12]。これらは VBS 状態が Heisenberg 模型においても基底状態の良い近似になっていることを示唆している。

1.4 Kennedy-Tasaki 変換

境界が open の有限系での基底状態の 4 重縮退は、実は $Z_2 \times Z_2$ の隠れた対称性の破れからくる [5]。Kennedy と Tasaki は非局所的ユニタリ変換により Hamiltonian の持つ隠れた $Z_2 \times Z_2$ 対称性を明らかにした。

Kennedy-Tasaki (KT) 変換 U は

$$U\Phi_\sigma = (-1)^{N(\sigma)}\Phi_{\bar{\sigma}}$$

で定義される。ここで Φ_σ は S_i^z を対角化する表示の基底で、 $\sigma = \{\sigma_i\}$, $\sigma_i = 0, \pm$ である。 $N(\sigma)$ は奇数番目のサイトに 0 が占める数で、 $\bar{\sigma}$ は $\bar{\sigma}_i = \exp(i\pi \sum_{l=1}^{i-1} \sigma_l) \sigma_i$ で与えられる。具体的には、例えば σ がストリングオーダーを持つ場合は

$$(0+ -00+00- +0-0) \longrightarrow -(0++00+00++0+0)$$

のようになる。

変換 U で重要なのは i サイトの左側のサイト l で $\sigma_l = \pm$ となる数を調べ、それが奇数なら σ_i を $-\sigma_i$ に反転させることである。従って、KT 変換は単純な演算子の形で

$$U = \prod_i U_i$$

$$U_i = \frac{1}{2}(1 + f_i^z) + \frac{1}{2}(1 - f_i^z) e^{i\pi S_i^z}$$

$$f_i^z = \exp\left(i\pi \sum_{l=1}^{i-1} S_l^z\right)$$

と書き直せる [6]。 $(1/2)(1 \pm f_i^z)$ は射影演算子になっており、 $(1/2)(1 + f_i^z)$ は i の左側のサイトで $\sigma_l = \pm$ の数が偶数なら 1、奇数なら 0 を与え、 $(1/2)(1 - f_i^z)$ は偶数なら 0、奇数なら 1 を与える。

KT 変換 U により、Hamiltonian (1.1) は

$$\tilde{H} = U H U^{-1} = - \sum_i \left[(S_i^x S_{i+1}^x + T_i^y T_{i+1}^y + S_i^z S_{i+1}^z) \right]$$

$$T = i S_i^y e^{i\pi S_i^z}$$

となる。元の Hamiltonian (1.1) の対称性は壊れており、 $Z_2 \times Z_2$ の対称性のみを持つ。一方、ストリングオーダー・パラメーター (1.3) は

$$\tilde{O}_{\text{str}}^\alpha = \lim_{|i-j| \rightarrow \infty} \langle S_i^\alpha S_j^\alpha \rangle, \quad \alpha = x, z$$

と変換される。系がストリングオーダーを持っている場合は $\tilde{O}_{\text{str}}^x > 0$, $\tilde{O}_{\text{str}}^z > 0$ となる。このことは秩序パラメーターとして $\langle S_i^z \rangle$, $\langle S_i^x \rangle$ がとれる ($\langle T_i^y \rangle$ の符号はこの 2 つで決まる) ことを表し、従って Haldane 状態においては \tilde{H} の $Z_2 \times Z_2$ 対称性が自発的に破れ、4 重縮退の基底状態をとる。また秩序パラメーターが $\langle S_i^z \rangle$ と $\langle S_i^x \rangle$ になることは、変換された系で第 1 近似として分子場が有効に働くことを表している。特に AKLT モデルでは、変換された Hamiltonian に対する分子場近似で 4 重縮退の VBS 状態が求まる。

VBS 状態に限らず、ダイマー状態を含むような相はストリングオーダーを持つ相として定義でき、KT 変換された Hamiltonian は分子場でよく近似される。実際 $S = 1/2$ 交代ボンド鎖 [7] や $S = 1/2$ Heisenberg 梯子模型 [8] にも応用され、分子場により系の性質が非常によく説明されている。特に交代ボンド鎖では、pure dimer に近い状態において分子場近似は数値計算と驚くほどよく一致している [9]。

2 密度行列繰り込み群

この章では White [13, 14] に従って、密度行列繰り込み群のレビューをする。この方法は外界の影響を取り込んで繰り込んでいくところに特徴があり、従来の方法に比べて量子系の基底状態が非常に正確に求まると期待されている。

2.1 数値繰り込み群の従来の方法

まず従来の 1 次元系の実空間数値繰り込み群の方法を紹介する。この方法は数値対角化と同じように絶対零度を対象としており、基底状態や低励起状態が得られるが、数値対角化より大きな系を扱えることが特徴である。Hamiltonian は Heisenberg 模型や Hubbard 模型といったものを考える。

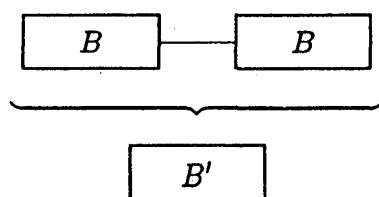


図 2.1: 従来の数値繰り込み群の基本的な方法。系は左右の同一の block からなり、1 回の繰り込みで系は 2 倍の長さになる。新しい block B' の基底は低励起の状態から選ぶ。

まず、無限に長い 1 次元鎖を有限の長さの同一の block に分割する。その有限の長さの block を m 個のエネルギーの低い固有状態で近似し、再び結合していくことで元の系を近似的に再現するわけである (図 2.1)。最初の block は 1 サイトだけからなると考えると簡単である。block を B , block Hamiltonian を H_B と書く。いま最初の block は 1 サイトとしているので、たとえば Heisenberg 模型では $H_B = 0$ となり、Hubbard 模型では $H_B = U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow})$ となる。元の Hamiltonian H を再現するには H_B 以外に 2 つの block の間の相互作用も必要で、Heisenberg 模型の場合は、

$$\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} = S_i^z S_{i+1}^z + \frac{1}{2}(S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+)$$

Hubbard 模型の場合は、

$$-\sum_{\sigma} (c_{i+1,\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} + c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i+1,\sigma})$$

である。

Heisenberg 模型に対する基本的な方法を以下にまとめる。Hamiltonian $H = \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}$ で、境界は open とする。

1. 基底をたとえば $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ として

$$H_B = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, S_r^z = S_l^z = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix}, S_r^+ = S_l^+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

とおく。 r は左の block の右端のサイト, l は右の block の左端のサイトを表す。最初の block は 1 サイトだけからなるとしたので, ここではまだ S_r, S_l とともに single site のスピンの演算子である。なお $S_r^- (S_l^-)$ は $S_r^+ (S_l^+)$ のエルミート共役なので特に求めておく必要はない。

2. 2 つの block を結合した Hamiltonian H_{BB} をつくる。

$$\begin{aligned} \langle i_1 i_2 | H_{BB} | i'_1 i'_2 \rangle &= \langle i_1 | H_B | i'_1 \rangle \langle i_2 | i'_2 \rangle + \langle i_2 | H_B | i'_2 \rangle \langle i_1 | i'_1 \rangle + \langle i_1 | S_r^z | i'_1 \rangle \langle i_2 | S_l^z | i'_2 \rangle \\ &\quad + \frac{1}{2} \left(\langle i_1 | S_r^+ | i'_1 \rangle \langle i_2 | S_l^- | i'_2 \rangle + \langle i_1 | S_r^- | i'_1 \rangle \langle i_2 | S_l^+ | i'_2 \rangle \right) \end{aligned}$$

ここで, $i_1 (i_2)$ は左 (右) の block の基底である。 H_B が $m \times m$ の行列のとき, H_{BB} は $m^2 \times m^2$ の行列である。また, block BB の右端 (左端) のスピン $S_r (S_l)$ についても

$$\begin{aligned} \langle i_1 i_2 | \tilde{S}_r^z | i'_1 i'_2 \rangle &= \langle i_2 | S_r^z | i'_2 \rangle \langle i_1 | i'_1 \rangle \\ \langle i_1 i_2 | \tilde{S}_l^z | i'_1 i'_2 \rangle &= \langle i_1 | S_l^z | i'_1 \rangle \langle i_2 | i'_2 \rangle \end{aligned}$$

などのように求めておく。

3. H_{BB} を対角化し, 固有値の小さいほうから m 個の固有ベクトル $u_{i_1 i_2}^\alpha$, $\alpha = 1, \dots, m$ を求める。固有値が m 個に満たないときはすべての固有ベクトルを求める。 H_{BB} を対角化するときは量子数で部分空間に分けるとよい。Heisenberg 模型の場合は S^z , Hubbard 模型の場合は, N_\uparrow, N_\downarrow を用いると簡単である。

4. 基底を $|i_1 i_2\rangle$ から $|u^\alpha\rangle$ に変換する。

$$\begin{aligned} \langle i | H_{B'} | i' \rangle &= \sum_{i_1 i_2 i'_1 i'_2} \langle i | O | i_1 i_2 \rangle \langle i_1 i_2 | H_{BB} | i'_1 i'_2 \rangle \langle i'_1 i'_2 | O | i' \rangle, \\ \langle i | S_{r'}^z | i' \rangle &= \sum_{i_1 i_2 i'_1 i'_2} \langle i | O | i_1 i_2 \rangle \langle i_1 i_2 | \tilde{S}_r^z | i'_1 i'_2 \rangle \langle i'_1 i'_2 | O | i' \rangle, \text{ etc.} \end{aligned}$$

ここで, $\langle \alpha | O | i_1 i_2 \rangle = u_{i_1 i_2}^\alpha$, $\alpha = 1, \dots, m$ であり, 従って $H_{B'}$ は対角行列になる。 O が正方行列なら, これはユニタリ変換だが, 最初の数回の繰り込みを除いて O は $m \times m^2$ の行列だから, この変換で高エネルギー状態を切り捨ててしまうことになる。

5. B' を B に置き換える。

6. Go to step 2.

Hubbard 模型についても同様に実行できる。以上の手続きは系が適当な大きさになるまで繰り返す。

この方法により, Bray と Chui [15] は 1 次元 Hubbard 模型を調べた。ところが非常に多くの状態 ($m \approx 1000$) で基底を表現したにもかかわらず, 16 サイトの系ですら基底状態や低励起のエネルギーで 5-10% の誤差があり, 32 サイト以上ではもはやまったく信頼できない

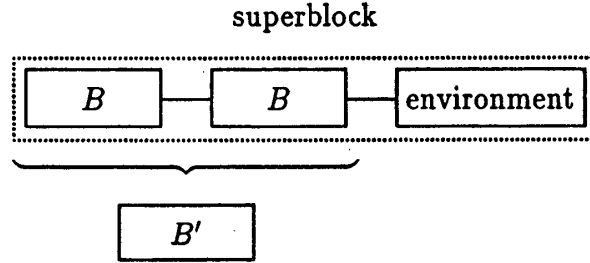


図 2.2: 従来の方法では外界との結合がないため、外界をとり入れた系を考える。外界を含めた全体を superblock と呼ぶ。block B' を表現する最適な基底は密度行列から選ばれることになる。

い値であった。Xiang と Gehring [16] は少しこの方法を変形して 1 次元 Heisenberg 模型に応用した。その方法は、2 つの block を結合するのでなく、block に 1 サイトずつ付加していくものである。これにより $m \approx 200$ 程度で、 $S = 1/2$ のサイトあたりの基底状態のエネルギーについては 5 桁の精度が得られた。この方法は 1 サイトだけを加えるという意味で後述する密度行列繰り込み群の方法と似ているが、密度行列繰り込み群の場合、より小さい m でも 9 桁程度の精度で基底状態のエネルギーが求まる。

2.2 密度行列による定式化

従来の方法は H_{BB} の基底の選び方に問題がある。 H_{BB} には block BB の外との相互作用はないので、その固有状態は block の両端で不適切である。 H_{BB} の固有状態は block 間の相互作用がゼロの極限のときだけ最適な基底である。この困難を取り除く方法が superblock による方法である。つまり B から B' をつくる際に、より大きな系 (superblock) から求めた基底を用いるのである (図 2.2)。

superblock を対角化して基底状態

$$|\psi\rangle = \sum_{ij} \psi_{ij} |i\rangle |j\rangle, \quad \psi_{ij}: \text{real}$$

を求めたとする。ここで $|i\rangle, i = 1, \dots, l$ は superblock のうち繰り込んで B' をつくる部分 (system), $|j\rangle, j = 1, \dots, J$ は superblock の残りの部分 (environment) である。系の最適な状態の組を $|u^\alpha\rangle, \alpha = 1, \dots, m$ とする。

$$|u^\alpha\rangle = \sum_i u_i^\alpha |i\rangle$$

一般に $m < l$ のとき $|u^\alpha\rangle$ で $|\psi\rangle$ を正確に記述することはできないが、

$$|\bar{\psi}\rangle = \sum_{\alpha j} a_{\alpha j} |u^\alpha\rangle |j\rangle \quad (2.1)$$

が $|\psi\rangle$ に十分近い状態になるように $|u^\alpha\rangle$ を選びたい。すなわち $a_{\alpha j}$ と $|u^\alpha\rangle$ を $\langle u^\alpha | u^{\alpha'} \rangle = \delta_{\alpha\alpha'}$ の条件のもとで適当に選んで、

$$S = \left| |\psi\rangle - |\bar{\psi}\rangle \right|^2 \quad (2.2)$$

を最小にしたい。(2.1) 式は $a_\alpha |v^\alpha\rangle = \sum_j a_{\alpha j} |j\rangle$, $v_j^\alpha = \langle j | v^\alpha \rangle$ として、

$$|\bar{\psi}\rangle = \sum_\alpha a_\alpha |u^\alpha\rangle |v^\alpha\rangle = \sum_{\alpha ij} a_\alpha u_i^\alpha v_j^\alpha |i\rangle |j\rangle$$

と書き直せる。従って (2.2) 式は、

$$S = \sum_{ij} \left(\psi_{ij} - \sum_{\alpha=1}^m a_\alpha u_i^\alpha v_j^\alpha \right)^2 \quad (2.3)$$

となり、ある m の値について u_i^α , v_j^α , a_α を適当に選んで、 S を最小にすればよいことになる。 $l \times J$ 行列 ψ_{ij} を特異値分解 [17] すると、

$$\psi = U D V^T$$

ただし

- U : $l \times l$ の直交行列
- D : $l \times l$ の対角行列
- V : $l \times J$ の列直交行列

である。これより (2.3) 式は

$$S = \sum_{ij} \left(\sum_{k=1}^l U_{ik} D_{kk} V_{jk} - \sum_{\alpha=1}^m a_\alpha u_i^\alpha v_j^\alpha \right)^2$$

となり、 S を最小にするには、 D の絶対値の大きい m 個の行列要素を a_α とし、対応する U, V の列ベクトルを $|u^\alpha\rangle$, $|v^\alpha\rangle$ とすればよいことがわかる。

実際には、系の最適な状態 u^α は密度行列から求められる。密度行列は

$$\rho_{ii'} = \sum_j \psi_{ij} \psi_{i'j} = \sum_{k=1}^l U_{ik} D_{kk}^2 U_{i'k}$$

$$\rho = U D^2 U^T$$

で、 U は ρ を対角化する。従って、 ρ の固有値 $w_\alpha = a_\alpha^2$ であり、 $|u^\alpha\rangle$ は ρ の大きい m 個の固有値に対応する固有状態である。 w_α は系が状態 $|u^\alpha\rangle$ である確率を表し、 $\sum_{\alpha=1}^l w_\alpha = 1$ である。

$$P_m = \sum_{\alpha=1}^m w_\alpha$$

とおくと、 P_m の 1 からのずれは、 m 状態で truncation したときの誤差の目安になり、truncation error を表す。結局、系の最適な状態は密度行列から選べばよいことになる。

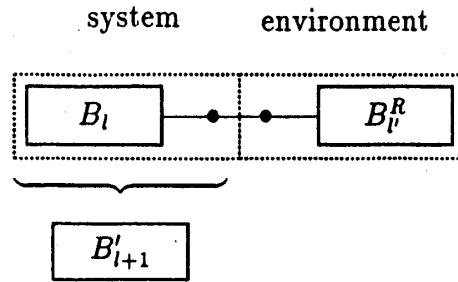


図 2.3: 境界が open のときの superblock の配置。左端と右端に block を配置し、その間に single site を 2 個置く。このとき左半分を system block, 右半分を environment block と呼ぶ。1 回の繰り込みで system block は 1 サイトずつ大きくなる。environment block の選び方によって, infinite system method と finite system method の 2 通りの方法に分かれる。

2.3 密度行列繰り込み群

境界が open のとき, superblock の配置は図 2.3 のようにとる。このような配置を以後, $B_l \bullet \bullet B_l^R$ と書く。 B_l は長さ l の block, B_l^R は長さ l' の reflected block, \bullet は single site を表す。 B'_{l+1} は block 同士の結合からではなく, block に single site を加えていく ($B_l \bullet \rightarrow B'_{l+1}$) ことでつくる。

block は図 2.3 のように, block の一端で結合している方が両端で結合するより正確なものが得られる。従って, 境界は periodic より open の方が適している。大ざっぱに言って, block の基底に m 状態を用いて open で得られた精度を periodic で得るには, 大体 m^2 の状態が必要と言われている。

以下ではまず, 境界が open のときを説明する。superblock の右半分にあたる environment block $\bullet B_l^R$ は密度行列をつくるときに trace out される。図 2.3 の superblock において, reflected block の選び方から 2 つの方法に分かれる。(infinite system method, finite system method)。infinite system method では繰り込みのたびに superblock が 2 サイトずつ長くなるが, finite system method では superblock の長さは一定である。

2.3.1 Infinite System Method

例として Heisenberg 模型

$$H = \sum_i S_i \cdot S_{i+1}$$

を用いて infinite system method のアルゴリズムを説明する。superblock の配置は図 2.4 のようにとり, 左右対称な系を考える。single site でも block と呼び, 左から block 1, block 2, block 3, block 4 と呼ぶ。 i_1, i_2, i_3, i_4 をそれぞれ block 1, 2, 3, 4 の状態とする。block 1 の右端のサイトのスピンを S_r , block 4 の左端のサイトのスピンを S_l と書く。

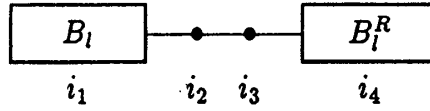


図 2.4: infinite system method での superblock の配置。environment block は system block と同じものを用いる。従って、1 回の繰り込みで superblock は 2 サイトずつ大きくなる。

1. 4 つの最初の block をつくる。block が 1 サイトだけからなるとすると、基底をたとえば $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ として、

$$H_{B_l} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, S_r^z = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix}, S_r^+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

とおく。 r は左の block の右端のサイトを表す。

2. superblock $B_l \bullet \bullet B_l$ の行列表示 $H_{B_l \bullet \bullet B_l}$ をつくる。

$$\begin{aligned} & \langle i_1 i_2 i_3 i_4 | H_{B_l \bullet \bullet B_l} | i'_1 i'_2 i'_3 i'_4 \rangle \\ &= \langle i_1 | H_{B_l} | i'_1 \rangle \langle i_2 i_3 i_4 | i'_2 i'_3 i'_4 \rangle + \langle i_4 | H_{B_l^R} | i'_4 \rangle \langle i_1 i_2 i_3 | i'_1 i'_2 i'_3 \rangle \\ &+ \langle i_1 i_2 | S_r \cdot S | i'_1 i'_2 \rangle \langle i_3 i_4 | i'_3 i'_4 \rangle \\ &+ \langle i_2 i_3 | S \cdot S | i'_2 i'_3 \rangle \langle i_1 i_4 | i'_1 i'_4 \rangle + \langle i_3 i_4 | S \cdot S | i'_3 i'_4 \rangle \langle i_1 i_2 | i'_1 i'_2 \rangle \end{aligned}$$

ここで、 S は single site のスピン演算子である。

3. Lanczos 法などを用いて superblock Hamiltonian $H_{B_l \bullet \bullet B_l}$ を対角化し、基底状態

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1 i_2 i_3 i_4} \psi_{i_1 i_2 i_3 i_4} |i_1 i_2 i_3 i_4\rangle$$

を求める。 $H_{B_l \bullet \bullet B_l}$ は S^z の部分空間に分けておくと簡単である。磁化や相関関数などはこの $|\psi\rangle$ を用いて計算する。

4. environment block を trace out して、system block に対する密度行列を求める。

$$\langle i_1 i_2 | \rho | i'_1 i'_2 \rangle = \sum_{i_3 i_4} \psi_{i_1 i_2 i_3 i_4} \psi_{i'_1 i'_2 i_3 i_4}$$

5. Householder 法などを用いて ρ を対角化し、大きい方から m 個の固有値 w_α と対応する固有ベクトル $u_{i_1 i_2}^\alpha$ を求める。 ρ は S^z について block diagonal なので、対角化は非常に効率よく実行でき、得られる固有ベクトル $u_{i_1 i_2}^\alpha$ は S^z の固有状態である。

6. system block に対する演算子 ($H_{B_l \bullet}$, S_r^z , etc.) の行列表示を求める。

$$\begin{aligned} \langle i_1 i_2 | H_{B_l \bullet} | i'_1 i'_2 \rangle &= \langle i_1 | H_{B_l} | i'_1 \rangle \langle i_2 | i'_2 \rangle + \langle i_1 i_2 | S_r \cdot S | i'_1 i'_2 \rangle \\ \langle i_1 i_2 | \tilde{S}_r^z | i'_1 i'_2 \rangle &= \langle i_2 | S^z | i'_2 \rangle \langle i_1 | i'_1 \rangle \\ \langle i_1 i_2 | \tilde{S}_r^+ | i'_1 i'_2 \rangle &= \langle i_2 | S^+ | i'_2 \rangle \langle i_1 | i'_1 \rangle \end{aligned}$$

S_l は S_r と等しいので考えなくてよい。



図 2.5: finite system method での superblock の配置。environment block は superblock の長さが一定になるように選ぶ。

7. 行列の基底を $|i_1 i_2\rangle$ から $|u^\alpha\rangle$ に変換する。

$$\begin{aligned}\langle i|H_{B_{l+1}}|i'\rangle &= \sum_{i_1 i_2 i'_1 i'_2} \langle i|O|i_1 i_2\rangle \langle i_1 i_2|H_{B_l}|i'_1 i'_2\rangle \langle i'_1 i'_2|O|i'\rangle, \\ \langle i|S_r^z|i'\rangle &= \sum_{i_1 i_2 i'_1 i'_2} \langle i|O|i_1 i_2\rangle \langle i_1 i_2|\tilde{S}_r^z|i'_1 i'_2\rangle \langle i'_1 i'_2|O|i'\rangle, \text{ etc.}\end{aligned}$$

ここで, $\langle \alpha|O|i_1 i_2\rangle = u_{i_1 i_2}^\alpha$, $\alpha = 1, \dots, m$ である。

8. Go to step 2.

ここで superblock の配置 $B_l \bullet \bullet B_l^R$ について補足しておく。外界を $\bullet B_l^R$ でなく B_l^R とし, superblock を $B_l \bullet B_l^R$ とすると Hilbert 空間の次元が小さくなり, より効率的に計算できると考えるかもしれない。しかし B_l (B_l^R) が m 状態, n を single site の自由度とすると, superblock が $B_l \bullet \bullet B_l^R$ のときには密度行列 ρ は nm 個の 0 でない固有値を持つが, superblock が $B_l \bullet B_l^R$ で environment block が B_l^R になると, 0 でない固有値は m 個しかとれない。つまり, もし最初に 1 サイトの block から繰り込みを始めたとしても, block B_l はいつまで経っても n 状態のままということになる。

2.3.2 Finite System Method

有限系の性質をより正確に調べるための方法として提案されたのが finite system method である。系の大きさを L とし, L は偶数とする。典型的な superblock の配置は図 2.5 である。infinite system method では B_{l+1} をつくるには B_l だけで必要で, それ以前の block の情報は必要でない。しかし finite system method では $L-3$ 個の block $B_1 \cdots B_{L-3}$ が必要である。このあたりの事情も含めて以下に finite system method のアルゴリズムをまとめる。finite system method の計算では一定の手続きを何回か繰り返す。このとき single site の対に注目すると, L サイトの系のなかであたかも左から右に動いているようであることから, この手続きをひとまとめにして sweep と呼ぶ。sweep の回数を I と書く。それぞれの sweep は $L-4$ 回の繰り込みからなる。

1. sweep 1

- (a) infinite system method で $L/2 - 1$ 回の繰り込みを行い, $B_2, B_3, \dots, B_{L/2}$ をつくる。

$$\left. \begin{array}{lcl} B_1 \cdots B_1^R & \Rightarrow & B_2 \\ B_2 \cdots B_2^R & \Rightarrow & B_3 \\ \vdots & & \\ B_{L/2-1} \cdots B_{L/2-1}^R & \Rightarrow & B_{L/2} \end{array} \right\} \text{Store !!}$$

ここで block だけでなく, 例えば Heisenberg 模型の場合 block の右端のサイト S_r も保存しておかなければならない。以下も同じである。

- (b) $l = L/2$ として繰り込みを始めて, $B_{L/2+1}, B_{L/2+2}, \dots, B_{L-3}$ をつくる。block 1 は B_l であり, block 4 には step 1 (a) でつくった block の reflection B_{L-l-2}^R を用いる。以後, 系の大きさは常に L である。

$$\left. \begin{array}{lcl} B_{L/2} \cdots B_{L/2-2}^R & \Rightarrow & B_{L/2+1} \\ B_{L/2+1} \cdots B_{L/2-3}^R & \Rightarrow & B_{L/2+2} \\ \vdots & & \\ B_{L-4} \cdots B_2^R & \Rightarrow & B_{L-3} \end{array} \right\} \text{Store !!}$$

2. sweep $I, I \geq 2$

- (a) $l = 1$ として繰り込みを始めて $B_{L/2-1}$ をつくるまで繰り返す。block 1 に B_l , block 4 には sweep $(I - 1)$ でつくった block の reflection B_{L-3}^R を用いる。

$$\left. \begin{array}{lcl} B_1 \cdots B_{L-3}^R & \Rightarrow & B_2 \\ B_2 \cdots B_{L-4}^R & \Rightarrow & B_3 \\ \vdots & & \\ B_{L/2-2} \cdots B_{L/2}^R & \Rightarrow & B_{L/2-1} \end{array} \right\} \text{Store !!}$$

- (b) $l = L/2 - 1$ として B_{L-3} をつくるまで繰り込みを行う。block 4 には step 2 (a) でつくった block の reflection を用いる。

$$\left. \begin{array}{lcl} B_{L/2-1} \cdots B_{L/2-1}^R & \Rightarrow & B_{L/2} \\ B_{L/2} \cdots B_{L/2-2}^R & \Rightarrow & B_{L/2+1} \\ \vdots & & \\ B_{L-4} \cdots B_2^R & \Rightarrow & B_{L-3} \end{array} \right\} \text{Store !!}$$

3. Go to step 2.

sweep は収束するまで繰り返す。通常 2, 3 回の sweep で収束する。物理量の計算は, 最後の sweep で superblock $B_{L/2-1} \cdots B_{L/2-1}^R$ を対角化してから行う。sweep を繰り返すこと

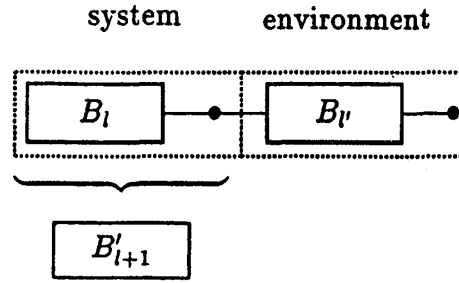


図 2.6: 周期的境界条件のときの superblock の配置。open のときと異なり block は両端で外と結合している。

により外界 B_{L-l-2}^R がより正確になり、従って左の block B_l も正確なものになるといわれている。

計算を効率的に行うために、White は block 4 の状態数 m' を block 1 の状態数 m に対して $m' < m$ のようにとるとよいと指摘している。block 1 は密度行列をつくるのに使われるのと同時に新しい block の一部にもなるが、block 4 は単に密度行列をつくるのに使われるだけだからである。具体的には最後の sweep の前までは block 1, 4 ともに m' 状態をとっておけばよい。最後の sweep では block 1 を m 状態、block 4 を m' 状態として $B_{L/2-2} \cdots B_{L/2}^R$ まで繰り込んで $B_{L/2-1}$ をつくり、最後に block 1, 4 ともに m 状態用いて $B_{L/2-1} \cdots B_{L/2-1}^R$ を対角化する。ところで n を single site の状態数とすると密度行列から得られる基底の数は nm' 個である。従って m' はいくらでも小さくできるわけではなく、 $m' \geq m/n$ とする必要がある。

2.3.3 周期的境界条件への応用

周期的境界条件への応用は非常に簡単である。superblock は図 2.6 のようにとるとよい。 $B_l \cdots B_{l'}$ ととるのは 2 つの大きな block が隣合わないようにするためである。2 つの block が隣合うと行列が sparse でなくなる。Hamiltonian の行列の非対角要素は r を block 1 の右端のサイト、 l を block 2 の左端のサイトとすると、

$$\langle i_1 | S_r^+ | i'_1 \rangle \langle i_2 | S_l^- | i'_2 \rangle \langle i_3 i_4 | i'_3 i'_4 \rangle$$

といった項からでてくる。行列が sparse であるかは行列の 1 行あたりの 0 でない行列要素の数ではかるとよい。つまり i_1, i_2 を固定して i'_1, i'_2 を動かして、0 でない固有値の数を数える。block 1, 2 が m 状態の block であるとするとき 0 でない要素の数は m^2 に比例するが、block 2 が single site のときは m に比例する。従って superblock は図 2.6 のようにとる。

superblock の配置が違うことを除けば、方法は境界が open のときとまったく同じである。しかし正確な計算をするためには open のときと比べ、より大きな m が必要であり、実際には簡単な $S=1/2$ の 1 次元鎖のときくらいしか実用的でない。

2.3.4 物理量の計算法

L サイトの系の superblock の配置は infinite system method では唯一であるが, finite system method では $L-3$ 通りある。このとき, どの superblock から物理量を計算してもよいが, 普通, 対称な superblock $B_{L/2-1} \cdots B_{L/2-1}$ が最も正確である。従って, 以下では両方の方法での物理量の計算法を同時に説明する。物理量 A の期待値は, superblock $B_{L/2-1} \cdots B_{L/2-1}$ を対角化して得られる波動関数 $|\psi\rangle$ から $\langle\psi|A|\psi\rangle$ として求めるが, A の基底の表現を $|\psi\rangle$ の基底と同じにしなければならない。つまり, 演算子 A の基底も逐次変換していかなければならない。ここでは例として, 磁化 $\langle\psi|S_j^z|\psi\rangle$ と相関関数 $\langle\psi|S_j^z S_k^z|\psi\rangle$ を例に挙げて説明する。

磁化 $\langle\psi|S_j^z|\psi\rangle$

サイト j が block 2, 3 (single site) にあるときは基底は自明なので考える必要はないが, block 1, 4 にあるときは適切な基底に変換する必要がある。実際には block 4 は block 1 の reflection なので, サイト j が block 1 に入るときだけ変換していけばよい。ここでは従って, サイト j が block 1 にあるときを考える。基底の変換は S_j^z が superblock に現れたときから追跡していけばよい。具体的には以下のように行う。

1. サイト j が block 2 (single site) に現れたら

$$\langle i_1 i_2 | \tilde{S}_j^z | i'_1 i'_2 \rangle = \langle i_2 | S^z | i'_2 \rangle \langle i_1 | i'_1 \rangle$$

のようにして system block に対する行列表現を求める。

2. 変換行列 O を求めて基底を変換する。

$$\langle i | S_j^z | i' \rangle = \sum_{i_1 i_2 i'_1 i'_2} \langle i | O | i_1 i_2 \rangle \langle i_1 i_2 | \tilde{S}_j^z | i'_1 i'_2 \rangle \langle i'_1 i'_2 | O | i' \rangle$$

この時点でサイト j が block 1 に組み込まれ, 次の繰り込みに移る。

3. サイト j は block 1 にあるので

$$\langle i_1 i_2 | \tilde{S}_j^z | i'_1 i'_2 \rangle = \langle i_1 | S_j^z | i'_1 \rangle \langle i_2 | i'_2 \rangle$$

のように system block に対する行列表現を求める。

4. 基底を変換する。

$$\langle i | S_j^z | i' \rangle = \sum_{i_1 i_2 i'_1 i'_2} \langle i | O | i_1 i_2 \rangle \langle i_1 i_2 | \tilde{S}_j^z | i'_1 i'_2 \rangle \langle i'_1 i'_2 | O | i' \rangle$$

5. Go to step 3.

以上の結果, 目的の superblock を得たら期待値を計算する。

$$\langle\psi|S_j^z|\psi\rangle = \sum_{i_1 i_2 i_3 i_4 i'_1} \langle\psi|i_1 i_2 i_3 i_4\rangle \langle i_1 | S_j^z | i'_1 \rangle \langle i'_1 i_2 i_3 i_4 |\psi\rangle$$

相関関数 $\langle \psi | S_j^z S_k^z | \psi \rangle$

相関関数 $\langle \psi | S_j^z S_k^z | \psi \rangle$ の計算方法はサイト j, k の位置に依存する。ここでは例としてサイト j, k が異なる block (block 1, block 4) にある場合と同じ block (block 1) にある場合を考える。

まずサイト j が block 1, サイト k が block 4 にある場合だが, このときは

$$\langle \psi | S_j^z S_k^z | \psi \rangle = \sum_{i_1 i_2 i_3 i_4 i'_1 i'_4} \langle \psi | i_1 i_2 i_3 i_4 \rangle \langle i_1 | S_j^z | i'_1 \rangle \langle i_4 | S_k^z | i'_4 \rangle \langle i'_1 i_2 i_3 i'_4 | \psi \rangle$$

を計算すればよい。追跡すべき演算子は $\langle i_1 | S_j^z | i'_1 \rangle, \langle i_4 | S_k^z | i'_4 \rangle = \langle i_1 | S_{L-k+1}^z | i'_1 \rangle$ であり, 先の 1 体の演算子のときと同じである。特にサイト j, k が reflection に対して対称なときは $\langle i_1 | S_j^z | i'_1 \rangle$ だけを変換していけばよいので非常に簡単である。相関関数を距離の関数として求めるときはこのようにするとよい。

サイト j, k が同じ block (block 1) にあるときは少しだけ複雑になる。

$$\langle \psi | S_j^z S_k^z | \psi \rangle \approx \sum_{i_1 i_2 i_3 i_4 i'_1 i''_1} \langle \psi | i_1 i_2 i_3 i_4 \rangle \langle i_1 | S_j^z | i'_1 \rangle \langle i'_1 | S_k^z | i''_1 \rangle \langle i''_1 i_2 i_3 i_4 | \psi \rangle$$

のように計算出来ないからである。このときは以下のようにすればよい。

1. サイト j が block 2 に現れたら

$$\langle i_1 i_2 | \tilde{S}_j^z | i'_1 i'_2 \rangle = \langle i_2 | S^z | i'_2 \rangle \langle i_1 | i'_1 \rangle$$

のように system block に対する行列表現を求める。

2. 変換行列 O を求めて基底を変換する。

$$\langle i | S_j^z | i' \rangle = \sum_{i_1 i_2 i'_1 i'_2} \langle i | O | i_1 i_2 \rangle \langle i_1 i_2 | \tilde{S}_j^z | i'_1 i'_2 \rangle \langle i'_1 i'_2 | O | i' \rangle$$

この時点でサイト j が block 1 に組み込まれる。

3. サイト k が superblock に現れるまで step 1, 2 を繰り返す。
4. サイト k が block 2 に現れたら

$$\langle i_1 i_2 | \widetilde{S}_j^z \widetilde{S}_k^z | i'_1 i'_2 \rangle = \langle i_1 | S_j^z | i'_1 \rangle \langle i_2 | S^z | i'_2 \rangle$$

のように system block に対する行列表現を求める。

5. 基底を変換する。

$$\langle i | S_j^z S_k^z | i' \rangle = \sum_{i_1 i_2 i'_1 i'_2} \langle i | O | i_1 i_2 \rangle \langle i_1 i_2 | \widetilde{S}_j^z \widetilde{S}_k^z | i'_1 i'_2 \rangle \langle i'_1 i'_2 | O | i' \rangle$$

ここでサイト k も block 1 に組み込まれる。

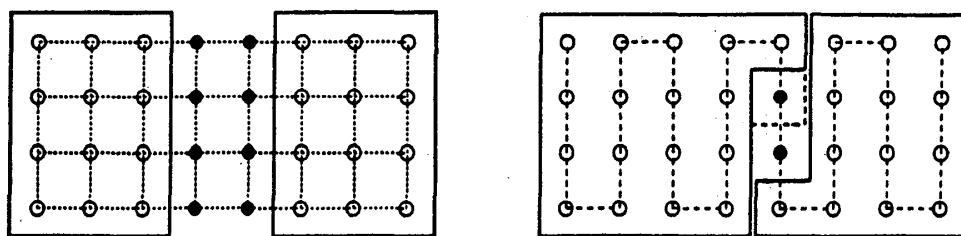


図 2.7: 密度行列繰り込み群の 2 次元への応用。左図は single site をサイトの列で置き換えたもの。この方法は単純だが, superblock の Hilbert 空間の次元が大きくなりすぎるため実際には実用的ではない。右図では superblock の Hilbert 空間の大きさを制限するため, block の間の single site を 2 個にしている。このとき system block と environment block に鏡映対称性がないため infinite system method が使えない。

6. サイト j, k はともに block 1 にあるので後は 1 体の演算子として追いかけていけばよい。

$$\langle i_1 i_2 | \widetilde{S_j^z S_k^z} | i'_1 i'_2 \rangle = \langle i_1 | S_j^z S_k^z | i'_1 \rangle \langle i_2 | i'_2 \rangle$$

7. 基底を変換する。

$$\langle i | S_j^z S_k^z | i' \rangle = \sum_{i_1 i_2 i'_1 i'_2} \langle i | O | i_1 i_2 \rangle \langle i_1 i_2 | \widetilde{S_j^z S_k^z} | i'_1 i'_2 \rangle \langle i'_1 i'_2 | O | i' \rangle$$

8. Go to step 6.

以上の結果, 目的の superblock を得たら期待値を計算する。

$$\langle \psi | S_j^z S_k^z | \psi \rangle = \sum_{i_1 i_2 i_3 i_4 i'_1} \langle \psi | i_1 i_2 i_3 i_4 \rangle \langle i_1 | S_j^z S_k^z | i'_1 \rangle \langle i'_1 i_2 i_3 i_4 | \psi \rangle$$

特に最近接スピンの相関を計算するときは step 3 がなくなるだけである。

2.4 密度行列繰り込み群の 2 次元への拡張

2 次元に拡張する 1 つの方法として block の間の single site をサイトの列で置き換えることが考えられる (図 2.7 の左図)。しかし single site が増えれば superblock の Hilbert 空間は指数関数的に大きくなる。特に Hubbard 模型の場合サイトあたりの自由度が大きく ($n=4$), またホールをドーピングするとより大きな m が必要なため, 梯子模型の場合ですら図 2.7 の左図の superblock の配置は困難である。

従って繰り込みの各段階で single site だけを加えるアルゴリズムが必要になる。これは 2 次元の格子の中を通る 1 次元の経路の上にサイトを置くことで実現する。典型的な配置は図 2.7 の右図である (サイト間の相互作用は省略して書いていない)。block の外の 2 つの single site を, その動きになぞらえて zipper と呼ぶ。太い点線で囲まれているサイトは

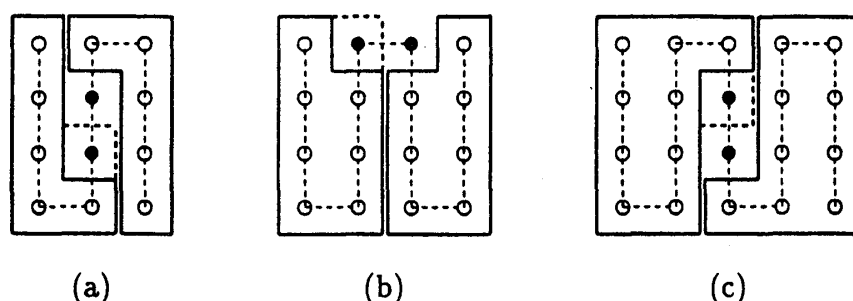


図 2.8: (a) sweep 1 での最初の superblock. block は 1 次元の方法から作る。finite system method により大きな system block を求め、その鏡映を environment block としてより大きな superblock (b), (c) を構成していく。

system block に取り込まれるものである。細い破線は finite system method での zipper の動く軌跡を表す。superblock は reflection に対して対称でないため、単純に infinite system method を用いて大きくすることはできない。従って基本的に finite system method を用いることになる。2 次元と 1 次元の finite system method は、単に block 間に余分な相互作用があること以外はまったく同じように実行できる。ただし sweep 1 で外界をどうするかが問題である。

1 次元系においては sweep 1 では infinite system method を用いて系を目的の大きさにすればよいが、2 次元では不可能なので最初の sweep が問題になる。sweep 1 では外界を考えないというのが最も簡単な方法である。つまり、system を対角化し、低エネルギーの m 状態を用いて Hamiltonian を記述するという、Wilson 流の実空間数値繰り込み群を用いる方法である。しかし Wilson 流の方法は 1 次元ですら非常に正確でなく、この方法は不可能である。

Noack らは sweep 1 で finite system method と infinite system method を混成させた方法を提案した [14]。例として 4 列の格子を考える。最初に長さ $L_y + 1$ の 1 列の block を 1 次元の infinite system method でつくる。 L_y は系の y 方向の長さで、いまは $L_y = 4$ である。これを図 2.8 (a) のように配置して superblock とする。ここで finite system method を何回か繰り返し大きな block をつくる。その reflection を外界として図 2.8 (b) の superblock を構成する。さらに finite system method を繰り返し大きな block を求め、図 2.8 (c) のような superblock をつくる。これを繰り返し系を目的の大きさにして sweep 1 が終わる。従って sweep 1 では finite system method の間に系の大きさは 1 列ずつ大きくなる。sweep 2 以降は普通の finite system method を行う。

block で保存する状態の数 m は block から出ている結合の手の数に依存し、少ないほど m が小さくても正確に計算できる。周期的境界条件より open の方が正確なものこのためである。上で説明した L_y 列の格子に対する方法も、従ってあまり大きな列のものは実際には困難である。Noack らは、この方法により Hubbard 梯子模型を研究した [14, 27, 28] が、特にホールをドーピングすると正確な計算は困難で $m = 400$ ないし 500 程度が必要だとしている。

3 量子梯子模型

3.1 梯子型化合物 $(\text{VO})_2\text{P}_2\text{O}_7$, $\text{Sr}_{n-1}\text{Cu}_{n+1}\text{O}_{2n}$

梯子模型に対応する物質としては $(\text{VO})_2\text{P}_2\text{O}_7$ と $\text{Sr}_{n-1}\text{Cu}_{n+1}\text{O}_{2n}$ がある。 $(\text{VO})_2\text{P}_2\text{O}_7$ [18, 19] には $(\text{V}=\text{O})^{2+}$ (バナダイル) カチオンがあり, 従ってバナジウム原子 V の酸化数は +4 で, 1 原子あたり 1 個の局在電子 (スピン 1/2) がある。この物質はバナダイル・カチオンとリン酸 $(\text{P}_2\text{O}_7)^{2-}$ からなる (図 3.1)。 a 軸に垂直な面内の, 梯子の格 (rung) にあたる V^{4+} イオンの原子間距離は 3.19\AA である。 $(\text{VO})_2\text{P}_2\text{O}_7$ は a 軸に平行に梯子型の構造を持ち, 梯子の角に V を含む 8 面体がある。梯子の格の間の距離は 3.864\AA である。

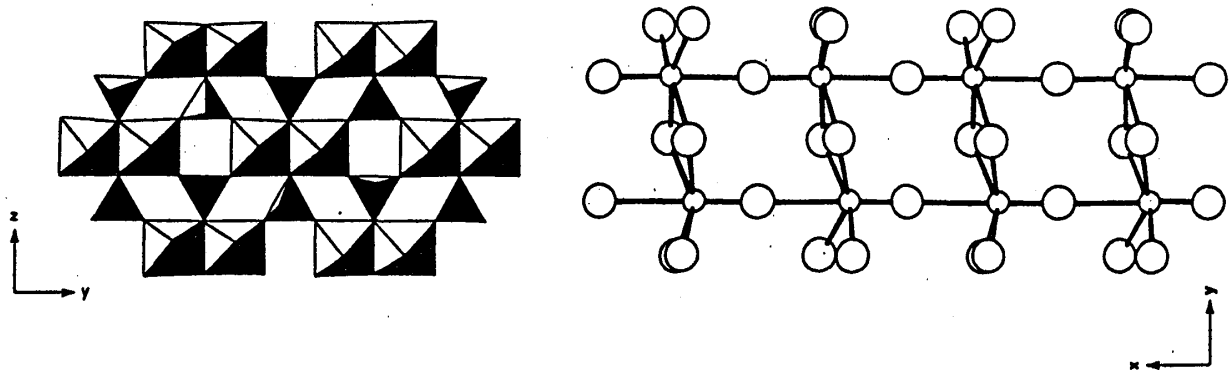


図 3.1: $(\text{VO})_2\text{P}_2\text{O}_7$ の構造。左図は梯子の断面で, 2 つ並んだ 8 面体がそれぞれ梯子の格にあたる。8 面体の中心に V^{4+} イオン, 4 面体の中心にリン原子があり, 頂点に酸素原子がある。梯子を結ぶのは磁性を持たないリン原子であるため, それぞれの梯子は独立である。右図は $(\text{VO})_2\text{P}_2\text{O}_7$ 面に垂直な方向の V^{4+} イオンの梯子構造である。小さい円はバナジウム原子, 大きい円は酸素原子を表す。

この物質の帯磁率は $J_1 = 11.3\text{meV}$, $J_2 = 7.9\text{meV}$ の 1 次元交代ボンド鎖で驚くほどよく説明された [18]。しかしこのことは $(\text{VO})_2\text{P}_2\text{O}_7$ が梯子模型であることを否定しているわけではない。実際, 交代ボンド鎖と梯子模型の熱力学的な性質は極めて似ている。最近の Barnes らの反強磁性 Heisenberg 梯子模型の数値対角化による研究 [22] から, $J_{\parallel} = 7.76\text{meV}$, $J_{\perp} = 7.82\text{meV}$ の梯子模型でも非常に正確に記述されることが分かった。励起スペクトルについては梯子模型と交代ボンド鎖の両方について求め, $J_{\perp}/J_{\parallel} = 1$ の梯子模型では $k = \pi/a = 0.813\text{\AA}^{-1}$ において 3.9meV のギャップがあり, $J_2/J_1 = 0.7$ の交代ボンド鎖ではギャップは 4.9meV という値を得た。交代ボンド鎖の場合, ボンドの結合の経路がはっきりしないため k の値が決まらない。エネルギー励起のスピンギャップは最近の非弾性中性子散乱の実験 [19] から 3.7meV ($k \approx 0.8\text{\AA}^{-1}$) と得られており, 梯子模型での値と非常によく一致している。このことから $(\text{VO})_2\text{P}_2\text{O}_7$ は反強磁性 Heisenberg 梯子模型でよく近似でき

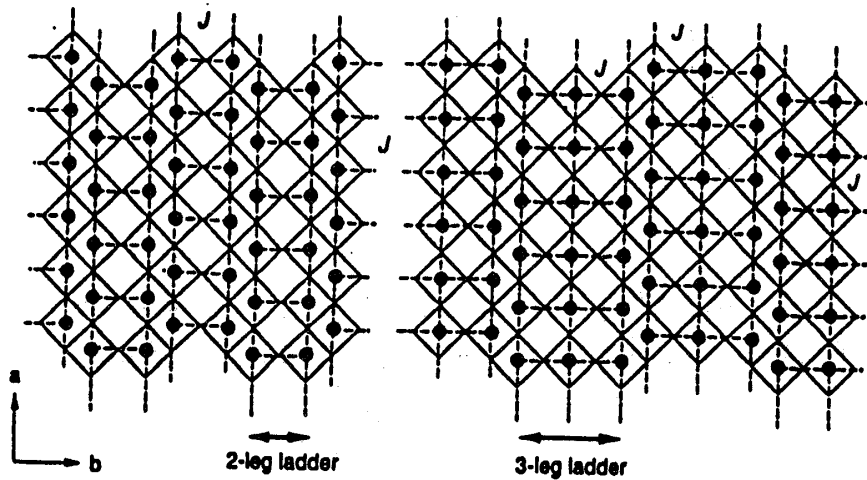


図 3.2: CuO_2 面内の梯子構造。 SrCuO_2 における CuO_2 面は高温にすることで一部が潰れ、梯子構造が現れる。左図は SrCu_2O_3 ($n=3$)、右図は $\text{Sr}_2\text{Cu}_3\text{O}_5$ ($n=5$)。黒丸は銅原子を表し、酸素原子は正方形の頂点にある。Sr は Cu で作られる正方形の中心にあり、 CuO_2 面の間に位置する。磁気的な相互作用は酸素を媒介としており、梯子間の相互作用は梯子内に比べて弱い。

ると期待されている。

一方、もう一つの梯子型の化合物の候補として $\text{Sr}_{n-1}\text{Cu}_{n+1}\text{O}_{2n}$ がある [20, 21]。この物質は $n \rightarrow \infty$ で CuO_2 面を持つ通常の高温超伝導体 SrCuO_2 になる。 SrCuO_2 は CuO_2 面の間に酸素を持たない Sr 面がある。 SrCuO_2 は Sr 面にホールか電子をドーピングすることで超伝導体になる。 SrCuO_2 は高温高圧の下で合成されるが、さらに高温にすることで $\text{Sr}_{n-1}\text{Cu}_{n+1}\text{O}_{2n}$ ($n=3, 5, 7, \dots$) が安定になる。 $\text{Sr}_{n-1}\text{Cu}_{n+1}\text{O}_{2n}$ は CuO_2 面内に $(n+1)/2$ 本の鎖からなる梯子を持つ (図 3.2)。梯子内での交換相互作用は反強磁性的であるが、梯子間の Cu 原子は O サイトを媒介とし 90° で結合しているため、強磁性的な相互作用になる。

この物質の特徴は梯子間のジグザグな結合にあり、図 3.2 のような格子になっている。梯子内の交換相互作用を J 、梯子間を J' と書くと、 $|J'|/J \sim 0.1-0.2$ 程度であり、第 1 近似としては J' を無視してよい。孤立した梯子では、鎖が奇数のときと偶数のときとでは基底状態は定性的に異なる [25]。 $n=5, 9, 13, \dots$ は鎖の数が 3, 5, 7, \dots の梯子に対応し、励起はギャップレスで、スピン相関はべき的に減少する。 $n=3, 7, 11, \dots$ は鎖の数が 2, 4, 6, \dots の梯子に対応し、励起スペクトルはギャップを持ち、スピン相関は short-range で指数関数的に減少する。このギャップは整数スピンの 1 次元鎖のときに現れる Haldane ギャップに対応し、スピンが大きくなると Haldane ギャップが指数関数的に小さくなるのと同様に鎖の数が多くなると急激に減少する。

2 本の梯子をジグザグに結合した格子では、分子場による解析によるとギャップが減少するどころかむしろ少し増大している [21]。これは図 3.2 の格子でも成り立ち、従って梯子間のフラストレートした交換相互作用によりスピン液体の状態が残ることになる。このことは他の high- T_c の化合物についても示唆を与える。high- T_c の試料のなかにはドーピングされ

ているときでもスピンギャップを持つものがあるが、このことを2次元反強磁性格子においてフラストレーションを持つ次近接相互作用により説明しようとする次近接相互作用が非常に大きくなり物理的でない。ところが、もし CuO_2 面がなんらかの微視的な構造を持っているとすればスピンギャップは極めて自然に説明される。

3.2 量子梯子模型

$(\text{VO})_2\text{P}_2\text{O}_7$ や $\text{Sr}_2\text{Cu}_4\text{O}_6$ といった梯子型の構造を持つ物質の発見や、スピン1の反強磁性 Heisenberg 鎖における Haldane 問題、高温超伝導などに関係して、2本の $S = 1/2$ Heisenberg 鎖からなる Heisenberg 梯子模型に関心が持たれている。鎖間相互作用が反強磁性的なとき、基底状態はスピン液体 [23, 24, 25] で、励起にギャップを伴い、スピン相関長は有限である。鎖内の交換相互作用を J 、鎖間を J' としたとき、 $J' \rightarrow \infty$ の場合の基底状態は明らかで梯子の格 (rung) の上の singlet の積で表される。このときギャップは J' のオーダーであるが、このような種類のギャップは $J' \rightarrow +0$ まで残る [23, 24, 33]。

スピン液体状態は短距離 RVB 描像で記述できる。White らは反強磁性的な鎖間相互作用を持つ等方的な n 列 Heisenberg 梯子模型 ($n \leq 4$) の基底状態が RVB 描像で表されることを示すために、密度行列繰り込み群で系の性質を調べた [25]。特に2列梯子模型の場合、dimer valence bond の配位は 'resonating' と 'staggered' の2種類ある (図 3.3)。図 3.4 のように梯子の両端に余分なスピンを加えると staggered な配位が起こりやすくなるが、このような配位は梯子の両端から離れると指数関数的に減少することを示した。従って resonating な配位が安定で、staggered な配位は仮にできて topological spin defect により有限の区間に収まる。resonating な配位が重要なのでボンドは鎖内に比べて鎖間の方が大きく、数値的な結果もこれを支持している。RVB 描像による議論は J' が小さいときにも成り立つ。 $J' \rightarrow +0$ のとき鎖間の valence bond が減少し resonating と staggered の配位の間のエネルギー差は小さくなるが、それでも有限の大きさのギャップが残る。このことは Barnes らや Dagotto らの数値対角化の結果 [23, 24] と矛盾しない。

最近、渡辺も図 3.4 のような反強磁性的な鎖間相互作用を持つ梯子模型を調べた [26]。先に述べたように、鎖内相互作用が0のときは基底状態は梯子の格がダイマー (singlet) になる。このようなダイマー状態を含む相は Haldane 相と同様にストリングオーダーを持つ相として定義できる。実際、Kennedy-Tasaki 変換を梯子模型に拡張し、図 3.4 の点線で囲まれたスピンを対にして変換した Hamiltonian に分子場近似を行うことで、基底状態にストリングオーダーがあることが示された ($J' = 2J$ のとき $O_{\text{str}} \approx 0.37$)。また、この値は数値対角化による結果とも一致している。

反強磁性的な鎖間相互作用の梯子模型で興味深いのは、ホールをドーピングしたときの基底状態である。2本の t - J 鎖を t - J' coupling で結合した t - J 梯子模型を考える。 $J' \gg J$ のときの基底状態は簡単である。half-filling のときは先に述べたように singlet rung の積であり、ホールをドーピングするなるべく singlet rung を壊さないように振舞い、ホールの対相関が増大する。実際、 2×8 の格子の数値対角化により、 $\langle n \rangle \sim 0.5$ の filling のとき J' を大きくしていくと超伝導の singlet 対相関が増大する結果が得られている [24]。

Hubbard 梯子模型の数値的な研究は Noack らによって精力的になされている [14, 27, 28]。

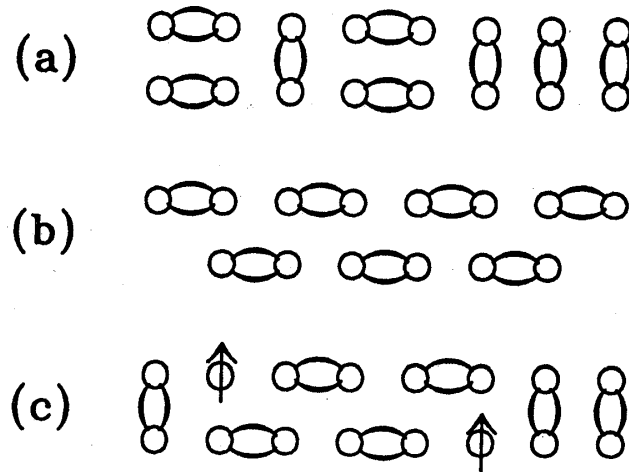


図 3.3: dimer valence bond の配位。(a) は resonating で, (b) は staggered を表す。resonating の方が安定で, staggered は仮にできたとしても (c) のように topological spin defect により有限の区間に収まる。

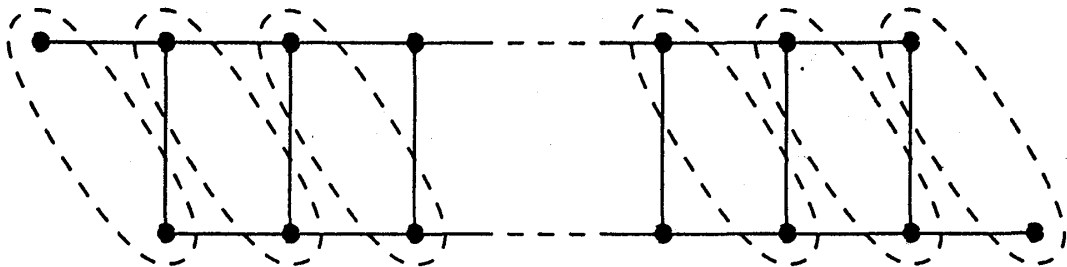


図 3.4: 両端に余分なスピンを加えた梯子模型。この模型では梯子の端の近くで staggered な配位が起こりやすいが, その影響は指数関数的に減少する。

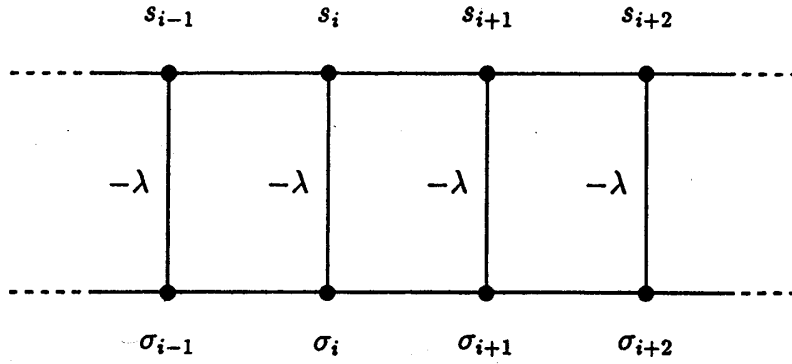


図 3.5: 2本の XXZ 鎖からなる Heisenberg 梯子模型。鎖間は等方的な相互作用である。

$U = 8t$ のとき, half-filling $\langle n \rangle = 1$ では singlet 対相関は距離とともに非常に急速に減少するが, filling $\langle n \rangle = 0.875$ ではベキ関数的に減少する [14, 27]。この singlet 対相関は, 格と格の間の対相関と格と梯子の足との間の対相関で符号が異なっており, d 波超伝導を示唆している。しかし $\langle n \rangle = 0.875$ のときの指数は -2 であり, これは on-site クーロン斥力 $U = 0$ のときと同じで, 実質的な超伝導の相関はこのパラメータ領域では見られない。ただし梯子間のホッピング t_{\perp} を変えると対相関の距離依存性が変化し, $t_{\perp} \sim 1.5t$ 程度でやや対相関が増大する傾向が見られ, それより大きくても小さくても対相関が抑えられる [28]。

3.3 $S = 1/2$ Heisenberg 梯子模型

次の Hamiltonian で表される $S = 1/2$ Heisenberg 梯子模型を考える (図 3.5)。

$$\begin{aligned}
 H &= H_s + H_{\sigma} + H_{s\sigma} \\
 H_s &= \sum_{i=1}^{L-1} (s_i^x s_{i+1}^x + s_i^y s_{i+1}^y + \Delta s_i^z s_{i+1}^z) \\
 H_{s\sigma} &= -\lambda \sum_{i=1}^L \mathbf{s}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_i
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

ここで H_s (H_{σ}) は $S = 1/2$ XXZ 鎖の Hamiltonian, $H_{s\sigma}$ は鎖間相互作用で, 等方的な相互作用を考える。 L は梯子の長さを表す。密度行列繰り込み群は周期的境界条件より開放端の方が正確に計算できるので, 境界は open とする。

この模型は $\lambda = 0$ で 2本の独立な $S = 1/2$ XXZ 鎖, $\lambda \rightarrow \infty$ では

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{L-1} (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y + \Delta S_i^z S_{i+1}^z) - \frac{L}{4} \lambda$$

で表される $S = 1$ の XXZ 鎖になる。 $S = 1/2$ XXZ 鎖については厳密に分かっており, $\Delta > 1$ は反強磁性 (AF) 相, $\Delta < -1$ は強磁性 (F) 相であり, $-1 < \Delta < 1$ では, 励起が

ギャップレスでスピン相関関数がベキに従って減少する相 (XY 相) が現れる。また, XY 相と AF 相の間の相転移は Kosterlitz-Thouless (KT) 転移である。 $S = 1$ XXZ 鎖については, 1 次元系が整数スピンと半整数スピンの定性的に異なるという Haldane 予想が出されて以後, 精力的に調べられてきた。数値計算によると, $\Delta < -1$ は F 相, $-1 < \Delta < 0$ は XY 相, $\Delta > \Delta_c$ が AF 相であり, $\Delta_c \sim 1.2$ として $0 < \Delta < \Delta_c$ にギャップを持ち, スピン相関が指数関数的に減衰する Haldane 相が現れる [29]。

$S = 1/2$ 梯子模型は鎖間相互作用 $-\lambda$ により, $S = 1/2$ と $S = 1$ の XXZ 鎖を内挿するモデルである。特に $\Delta - \lambda$ の相図において $S = 1$ の Haldane ギャップにつながるエネルギー・ギャップを持つ相 (この相を Haldane 相と呼び, 対応するギャップを Haldane ギャップと呼ぶことにする) と XY 相がどのように広がっているかについて関心が持たれている。

非線形 σ モデルへのマッピングによる解析 [31] からは, 図 3.6 の相図が得られた。しかしこれは半古典近似であり, 異方性のある領域からの展開で求めているため, 特に $\Delta = 1$ ではあまり信頼できない。一方, プロジェクター・モンテカルロ法と数値対角化を用いた数値計算 [30] によれば, $\Delta = 1$ のとき λ の大きい領域で明らかにギャップが開いている (図 3.7)。図 3.7 によるとギャップは $\lambda = 1.0$ から 0.6 の間で急速に小さくなり, $\lambda \leq 0.6$ では誤差が大きくよく分らないがギャップは開いていないようである。これより, 飛田は $\Delta = 1$ のとき有限の大きさの λ_c が存在し, $\lambda > \lambda_c$ のとき Haldane 相, $\lambda < \lambda_c$ のとき XY 相と結論している。

これに対して渡辺-野村-高田や Strong-Millis による bosonization を用いたスケーリング解析からは, 鎖間相互作用が少しでも入ると励起にギャップを持つ相に転移し, XY 相は $\lambda = 0$ の線上 ($-1 \leq \Delta \leq 1$) にしか存在しないという結果が得られている [32, 33]。また, 繰り込み群の解析によると転移は 2 次であり, 臨界指数は $\eta \sim 1$ である。さらに, このギャップを持つ相がストリングオーダーを持ち, $\lambda \rightarrow \infty$ で $S = 1$ の Haldane 状態につながる相であることが Kennedy-Tasaki 変換を拡張して高田-渡辺により示されている [8]。相図は図 3.8 のようになる。

スケーリング解析では umklapp 項は irrelevant なため, 無視している。一方, umklapp 項は $S = 1/2$ Heisenberg 鎖では relevant で KT 転移を導き, XY 相と AF 相を分ける臨界点を与える。従って, 少なくとも $\lambda \ll 1$ では鎖内の umklapp 項は relevant で KT 転移を与えると考えられる。このようにして渡辺-野村-高田は図 3.8 から図 3.9 の左図の相図を導いている。飛田の数値計算 [30] は KT 転移を支持しているようにもみえる。渡辺はさらに $\Delta = 1$ においてギャップを数値対角化で調べた [34]。それによると臨界点は $\lambda_c = 0$ を示唆しているが, 転移は 2 次的で先の bosonization による解析とは一致しない (図 3.9 の右図)。特に図 3.9 の左図のような 2 次元的に広がる XY 相を持つには転移は KT 的でなければならない。

これまでの数値的な研究は厳密対角化を主な手段としている。プロジェクター・モンテカルロ法も一部使われているが, 格子の大きさは 2×30 までである。ところが梯子模型では有限サイズ効果が大きく, 実際, 図 3.7 に見られるように系の大きさは十分でなく, 正確な外挿は非常に困難である。それに対して密度行列繰り込み群の方法は大きな系の基底状態や低励起状態を精度よく求められると期待されている。そこでこの方法で $S = 1/2$ Heisenberg 梯子模型を調べた。

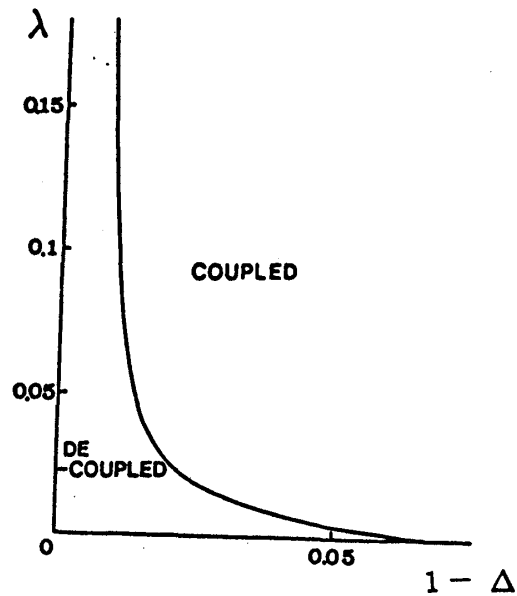


図 3.6: 非線形 σ モデルへのマッピングによる相図。DE-COUPLED と COUPLED はそれぞれ XY 相と Haldane 相を表す。

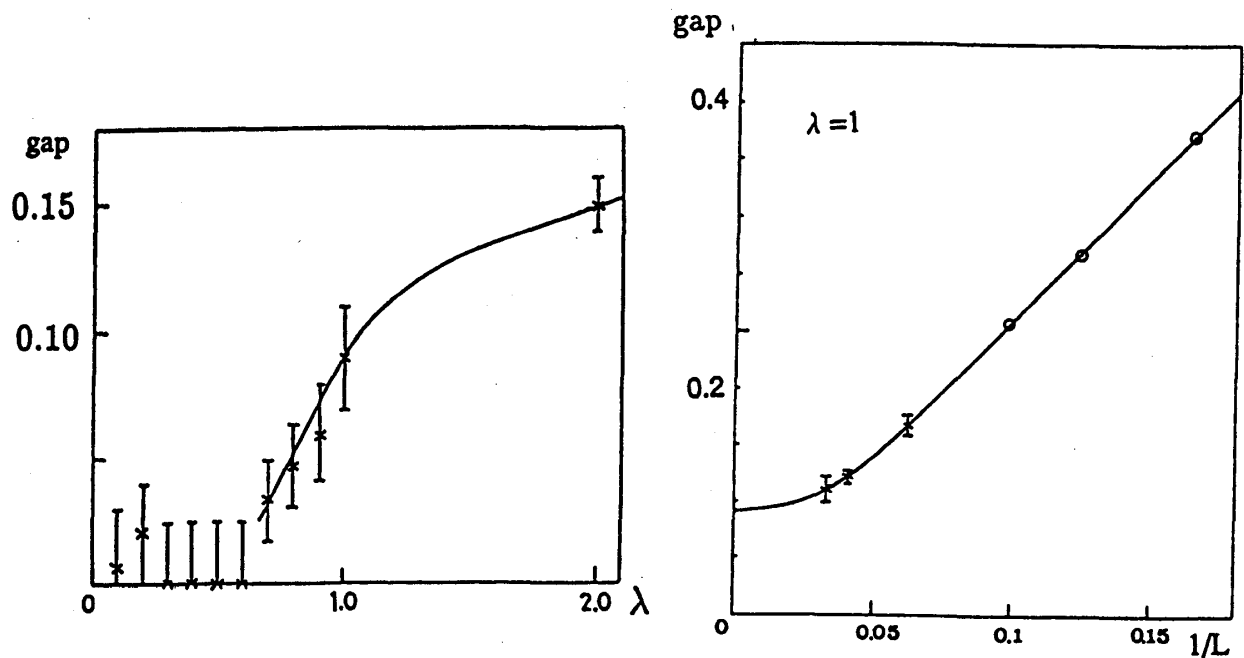


図 3.7: プロジェクター・モンテカルロ法と数値対角化から求めたエネルギー・ギャップ。左図は $E_{\text{gap}}(L, \lambda) = E_{\text{gap}}(L, \infty) + \delta(\lambda)L^{\alpha(\lambda)} \exp(-L/\xi(\lambda))$ により無限系の値に外挿したギャップを鎖間相互作用 λ に対してプロットしたものである。右図は外挿の一例で、 $\lambda = 1$ のときのものである。データの数が少ないため最小 2 乗フィットの誤差が大きくなっている。

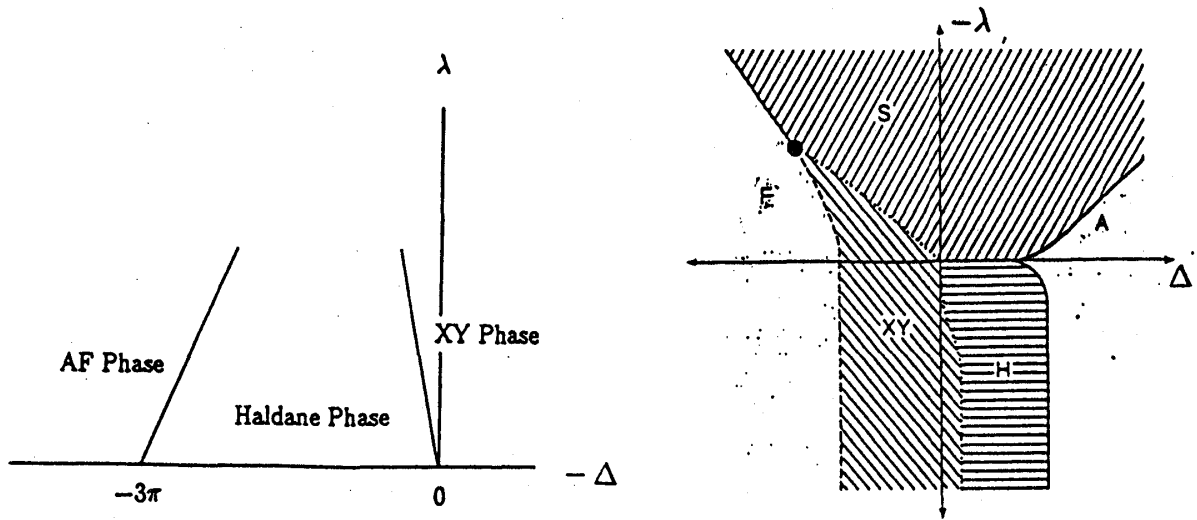


図 3.8: bosonization を用いたスケーリング解析による相図。左図は渡辺らの結果で、右図は Strong らによるもの。右図では $J_K/J_{xy} = -\lambda$ である。Haldane 相と XY 相の間は 2 次転移で、臨界指数は $\eta \sim 1$ である。

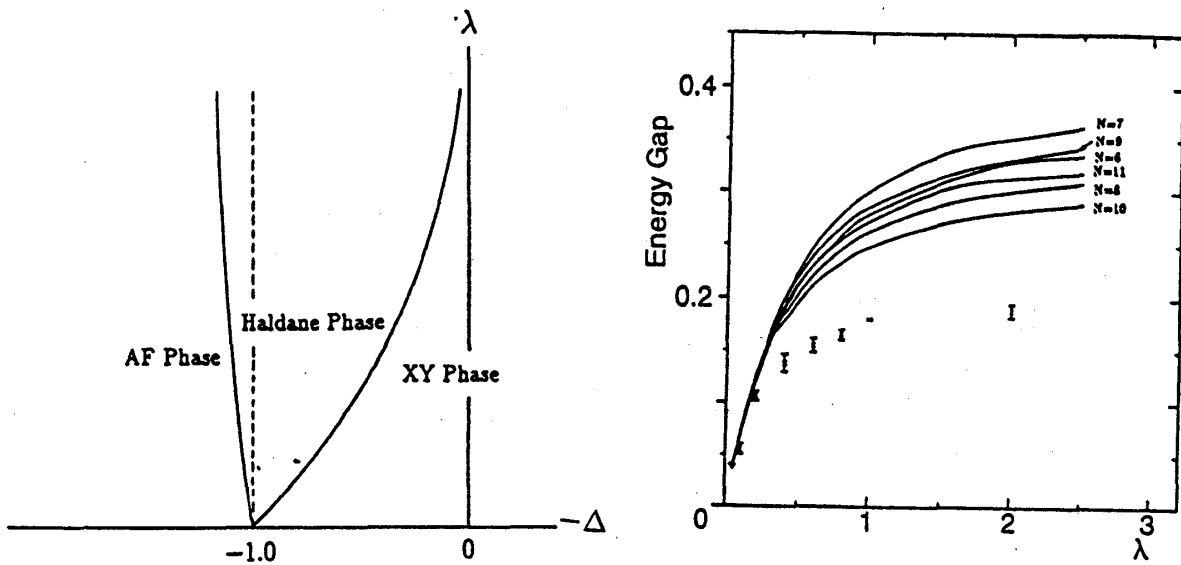


図 3.9: 左は λ の十分小さい領域で umklapp 項が relevant であるとして導いた相図。Haldane 相と XY 相の間は KT 転移である。 $\Delta = 1$ のときの臨界点 λ_c は $\lambda_c = 0$ と仮定している。右は渡辺による $\Delta = 1$ での数値対角化の結果。

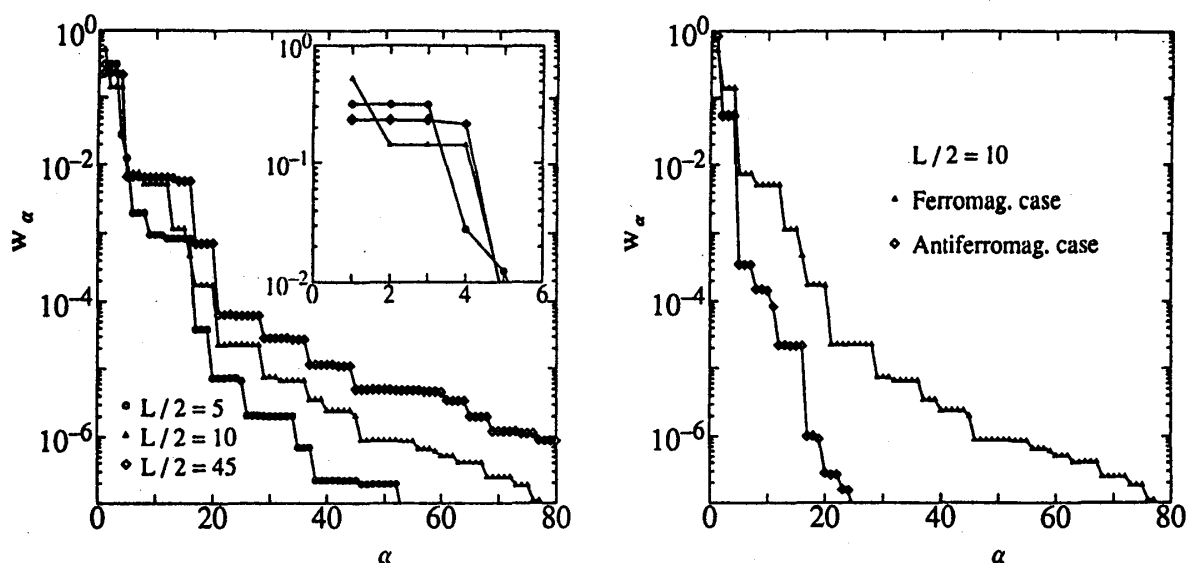


図 3.10: 密度行列の固有値 w_α を大きい順に並べた。 $\Delta = 1, \lambda = 1$ である。system block を表現する基底の数は、この固有値の大きさを目安にして選ぶ。左図は強磁性的な鎖間相互作用の場合で、梯子が長くなると基底状態は 4 重に縮退する。右図は反強磁性的な場合と強磁性的な場合を比べたもの。反強磁性的な場合、基底状態に縮退がないため固有値の収束は大変良い。

3.4 密度行列繰り込み群による研究

図 3.10 は密度行列の固有値 w_α を大きい順 (α) に並べたものである。 $\Delta = 1$ で、左図は $\lambda = 1$ (強磁性的) の場合で、右図は $\lambda = -1$ (反強磁性的) と $\lambda = 1$ (強磁性的) を比べたものである。 L は superblock の長さで、密度行列は environment block を trace out しているため長さ $L/2$ の梯子について対角化している。偶数の長さの梯子では singlet が基底状態、triplet が第 1 励起状態で、奇数の長さの梯子では triplet が基底状態、singlet は第 1 励起状態になるが、密度行列の固有値の分布もそれと一致している。梯子が十分長くなると singlet と triplet の密度行列の固有値の差は非常に小さくなり、 $L \rightarrow \infty$ で基底状態が 4 重縮退していることも分かる。梯子が長くなると基底状態に寄与する低励起状態が増え、密度行列の固有値の収束が悪くなる。つまり大きな系を扱うには非常に大きな m が必要で、数値計算は困難になる。一方、反強磁性的なときは基底状態は唯一つで収束は大変よい。

3.4.1 Edge Effect

密度行列繰り込み群の性質により、境界条件は open で計算しているため有限系の計算では edge の影響がでてくる。図 3.11 は最近接スピン間の相関で、ボンドの強さを表している。梯子の両端では、edge の影響で端から奇数番目のボンドが非常に強く、偶数番目はそ

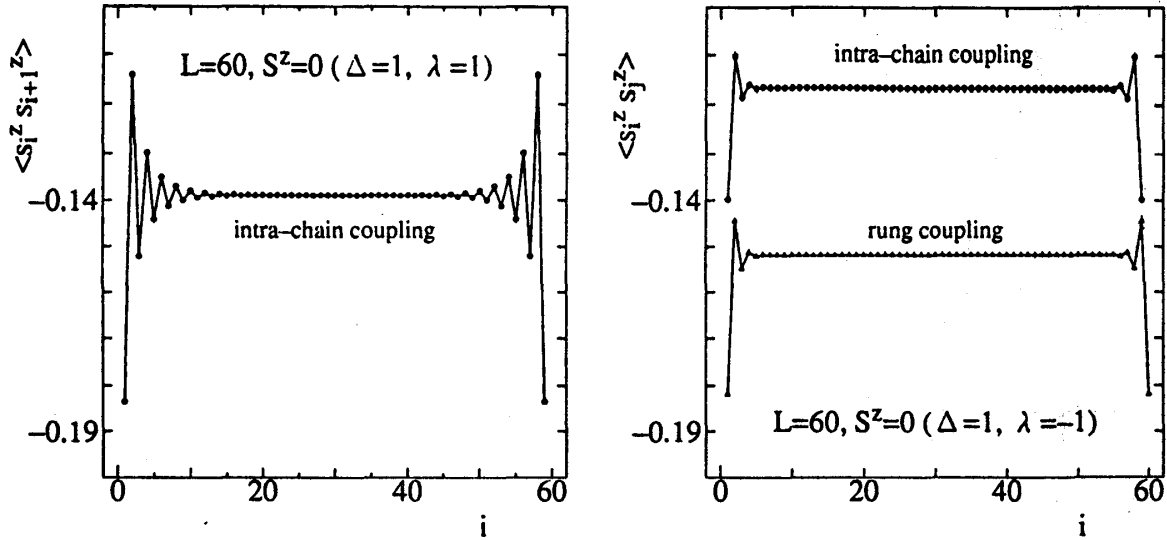


図 3.11: 最近接スピンの相関。左図は鎖間相互作用が強磁性的な場合で、右図は反強磁性的な場合。

れに比べて弱くなっているが、そのような振舞いは指数関数的に減衰する。鎖間相互作用が反強磁性的なときは梯子の格におけるダイマー状態が強いが、強磁性的な場合には鎖内のダイマーでエネルギーを低くしていると考えられる。

Hamiltonian (3.1) で表される Heisenberg 梯子模型は、密度行列の固有値の分布からも分かるように少なくとも $\lambda \sim 1$ 程度の領域では Haldane 相に属する。有限の $S=1$ の 1 次元鎖では量子モンテカルロ法 [11] や密度行列繰り込み群の方法 [12, 13] により、VBS 状態で説明される edge spin が得られているので、梯子模型でもこのような edge state が期待される。図 3.12 は $S^z=1$ の基底状態で $\langle S_i^z \rangle = \langle s_i^z + \sigma_i^z \rangle$ を求めたものである。 $L=119$ のときは明らかに edge spin が見られる。さらに梯子の両端の磁化が $\langle S_i^z \rangle \propto e^{-i/\xi}$ に従うとして相関長 ξ を評価したところ、 $\xi^{-1} \approx 0.095$ なる値を得た。これは後で導入する相関長とほぼ一致している。

3.4.2 Haldane ギャップと相関長

$\Delta=1, \lambda=1$ のときのエネルギー・ギャップは図 3.13 のようになる。 $E_n(S^z)$ は S^z の部分空間の第 n 励起状態のエネルギー固有値とする。 $n=0$ は基底状態を表す。 singlet と triplet の間のギャップは $L \rightarrow \infty$ とともに指数関数的に減少し、4 重に縮退した基底状態の上の quintet との間にギャップが開く。 $\Delta=1, \lambda=1$ のときのエネルギー・ギャップは $m=112$ のとき $E_{\text{gap}} \approx 0.158$ 、 $m=100$ のとき $E_{\text{gap}} \approx 0.161$ である。無限系への外挿は

$$E_{\text{gap}}(L; \Delta, \lambda) = E_{\text{gap}}(\infty; \Delta, \lambda) + \delta(\Delta, \lambda) L^{\alpha(\Delta, \lambda)} e^{-L/\xi(\Delta, \lambda)} \quad (3.2)$$

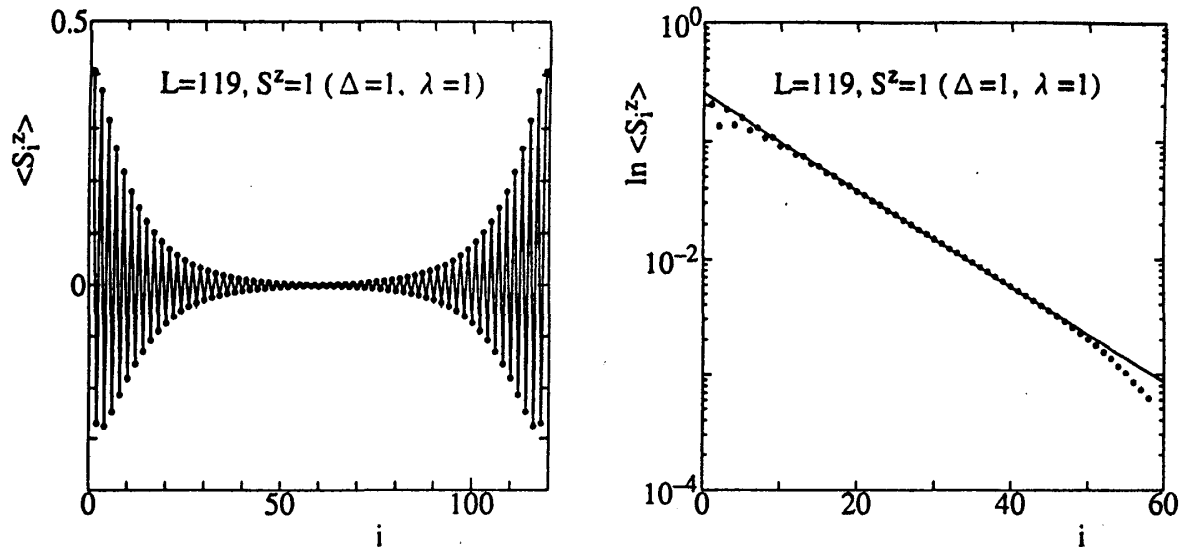


図 3.12: $S = 1/2$ Heisenberg 梯子模型 ($\Delta = 1, \lambda = 1$) の両端に現れる磁化。 $S_i^z = s_i^z + \sigma_i^z$ である。

によって行った。

第 3.3 節で述べたように強磁性的な鎖間相互作用を持つ梯子模型は $S = 1$ と $S = 1/2$ の 1 次元鎖を内挿するモデルであり、Haldane 的なギャップを持つ相がどのように広がっているかに興味を持たれている。そこで、Heisenberg 点 $\Delta = 1$ で $\lambda \rightarrow +0$ のときと、 $\lambda = 1$ で $1 \leq \Delta \leq 1.25$ のときに Haldane ギャップを持つ相がどこまで続いているかを調べた。前者については、Haldane 的なギャップが λ の小さいところまで続いているかどうか、厳密対角化やプロジェクター・モンテカルロ法で調べられてきた [30, 34] が、系が小さくはまだ確定的なことは分かっていない。後者については単純な推察はつく。AF 相が $S = 1/2$ の 1 次元鎖 ($\lambda = 0$) のときは $\Delta > 1$ 、 $S = 1$ の 1 次元鎖 ($\lambda \rightarrow \infty$) のときは $\Delta > 1.2$ にあることから $\lambda = 1$ の場合には転移点 Δ_c が $1 < \Delta_c < 1.2$ にあることが予想される。

図 3.14 は無限系に外挿したエネルギー・ギャップである。エネルギー・ギャップは Haldane 相では $E_1(S^z = 1) - E_0(S^z = 0)$ として、(3.2) 式によって外挿し、AF 相では $E_0(S^z = 1) - E_0(S^z = 0)$ から L^{-1} について 6 次までのベキで、

$$E_{\text{gap}}(L) = E_{\text{gap}}(\infty) + a_1 L^{-1} + a_2 L^{-2} + \dots \quad (3.3)$$

に従って外挿した。左図は $\Delta = 1$ として $\lambda \rightarrow +0$ としたときのエネルギー・ギャップで、異なる m の値でエネルギー・ギャップを外挿したときの値のずれを誤差の目安としている。 m は 80 から 128 の間で選んでいる。右図は $\lambda = 1$ として Δ を変化させたときのエネルギー・ギャップである。右図では主に $m = 80, 100$ を用いたが、ギャップの m 依存性はほとんどなく十分収束していると考えられる。ただし、 $\Delta = 1.1 \sim 1.15$ ではエネルギー

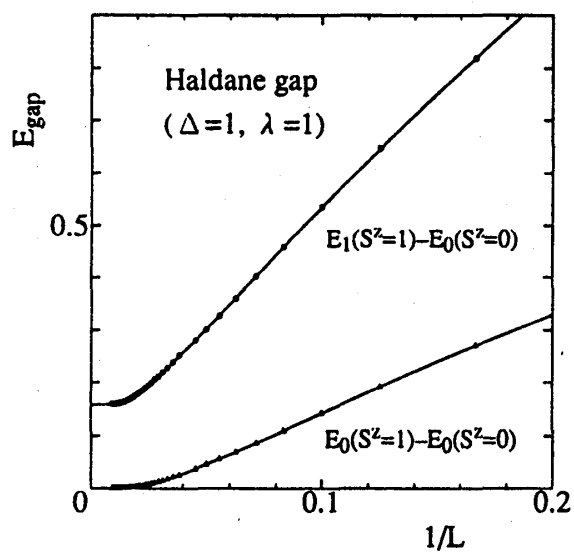


図 3.13: $S=1$ の Haldane ギャップにつながるエネルギー・ギャップ。 $m=112$ である。

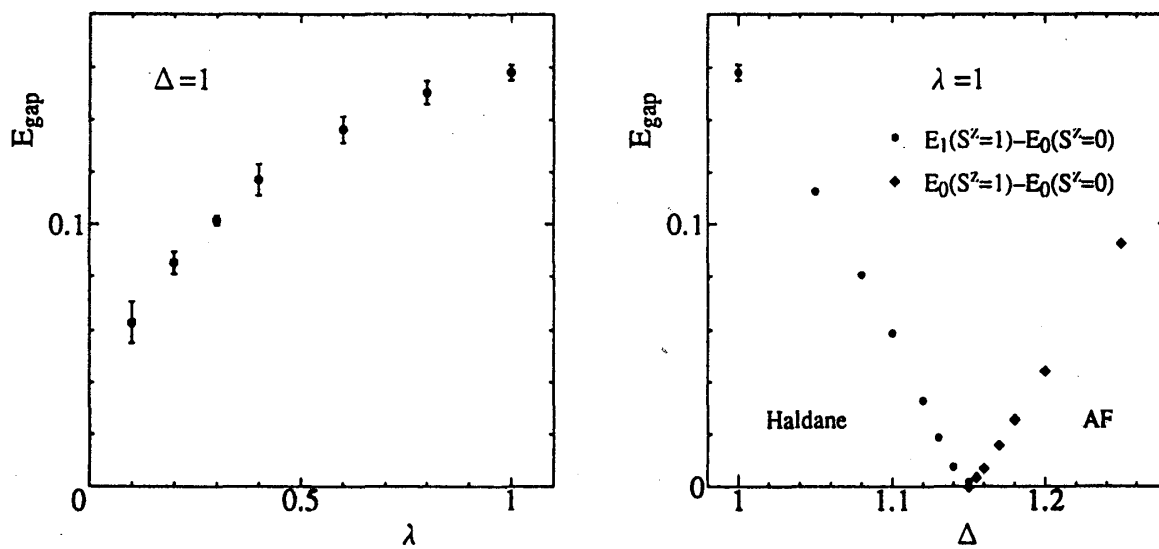


図 3.14: 左図は $\Delta=1$ として λ を小さくしていったときのエネルギー・ギャップの振舞い。右図は $\lambda=1$ として Δ を動かしたときのエネルギー・ギャップ。

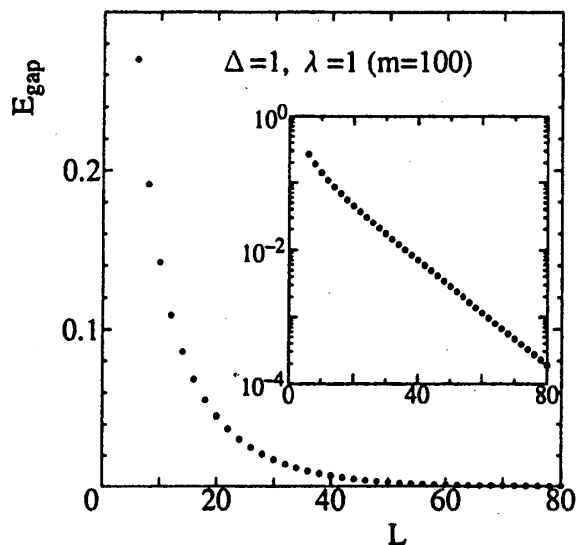


図 3.15: singlet-triplet ギャップ E_{gap} の長さ L に対する依存性。

ギー・ギャップの指数関数的な収束がみられず、べき的に減衰していたため (3.3) 式で外挿した。そのため大きな誤差を含んでいる可能性もある。左図からはギャップが $\lambda \rightarrow +0$ ままで開いていることが示唆される。また、転移は KT 的ではなく 2 次転移のようである。右図は Haldane 相と AF 相が同じ点で閉じている様子を表す。臨界点は $\Delta_c \approx 1.15$ であり、臨界指数は bosonization [32] による $\nu = 1$ を支持しているようである。

一方、エネルギー・ギャップを直接求めにくい領域では、相関長により解析した。Haldane 相では図 3.12 から分かるように、境界が open のとき系の両端に $S = 1/2$ のスピンの残り、基底状態は 4 重に縮退している。従って有限系での疑似的なギャップは指数関数的に減少し、

$$E_{\text{gap}}(L; \Delta, \lambda) \propto \exp(-L/\xi(\Delta, \lambda)) \quad (3.4)$$

から相関長 $\xi(\Delta, \lambda)$ が決まる。臨界点 λ_c は相関長が発散する点として決まる。

図 3.15 は $\Delta = 1, \lambda = 1$ のときの singlet と triplet の間のエネルギー・ギャップを長さ L に対してプロットしたものである。明らかに singlet と triplet は縮退しており、基底状態が 4 重に縮退していることを表している。

従って (3.4) 式により相関長 $\xi(\Delta, \lambda)$ を評価することが出来るが、真のエネルギー・ギャップを直接評価する場合と異なり、(3.4) 式に従って相関長を決める場合、特に高い精度でギャップを評価する必要がある。密度行列繰り込み群の方法の精度は m に依存する。特に λ の小さい領域ではこの誤差は無視できない。例えば $\Delta = 0.9, \lambda = 0.2$ におけるエネルギー・ギャップの、異なる m に対する振舞いは片対数でプロットすると図 3.16 のようになる。

密度行列繰り込み群の方法では、量子モンテカルロ法や量子転送行列法などと異なり系統

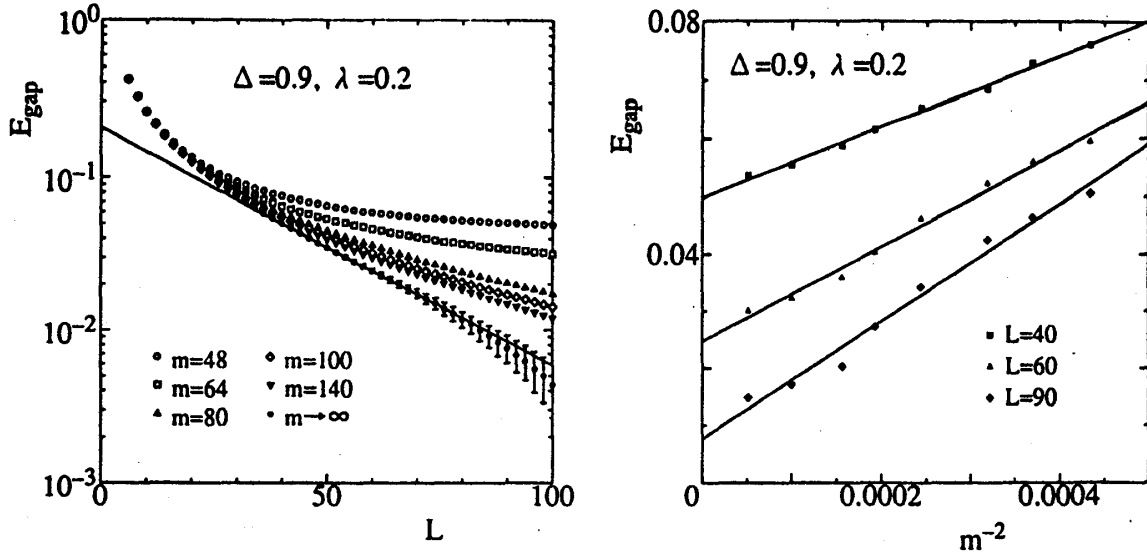


図 3.16: ギャップ $E_{\text{gap}} = E_1(S^z=0) - E_0(S^z=0)$ の m 依存性。 m が大きいほど正確な値である。右図は $L=40, 60, 90$ について、ギャップを m^{-2} に対してプロットしたものである。これにより $m \rightarrow \infty$ でのギャップの値を求める。 m^{-2} からの階段型のずれは密度行列の固有値の構造からきていると考えられる。

誤差がどのように伝播するか分かっていない。ところが、エネルギー・ギャップを m に対してプロットしてみるとこのモデルでは明らかに m^{-2} に依存していることが分かる (図 3.16)。ただし、図 3.16 には階段型のずれがみられ、特に梯子が長くなるとこのずれは大きくなっている。このような励起状態における縮退からきていると思われる。つまり block を表現する基底の数 m を、縮退の途中で切ってしまったためであると考えられる。

図 3.17 は $L \rightarrow \infty$ で縮退するエネルギー・ギャップを m^{-2} で外挿した結果である。 m は主に 48, 64, 80, 100, 120, 140 を取った。 λ の大きい領域では $m=100$ くらいまでで外挿したが、 λ の小さい領域では大きな m でのギャップを用いて外挿した。誤差は m の外挿の際の最小 2 乗法の当てはめからくるものである。異方性 Δ は $\Delta=1, 0.9, 0.8$ について調べた。この傾きから逆相関長 $\xi^{-1}(\Delta, \lambda)$ を決定する。

逆相関長 ξ^{-1} を λ の関数として求めたのが図 3.18 である。 $\Delta=1$ のときには図 3.14 と同じ振舞いをしていることが分かる。 $\Delta=1, \lambda=1$ のときの逆相関長は $\xi^{-1} \approx 0.097$ で edge spin から評価した値とほぼ一致している。グラフは転移が Kosterlitz-Thouless 的でなく、通常の 2 次相転移であることを示唆している。転移点は $\Delta=1 \sim 0.8$ について、 $\lambda_c \sim 0$ のようである。これは $\Delta=1$ での渡辺の数値計算の結果 [34] を支持している。図 3.18 の両対数プロットの傾きから、

$$\xi^{-1} \sim |\lambda - \lambda_c|^\eta$$

としたときの指数 η は $\Delta=1$ のとき λ の小さい方から 4 点を用いると $\eta = 0.83 \pm 0.04$,

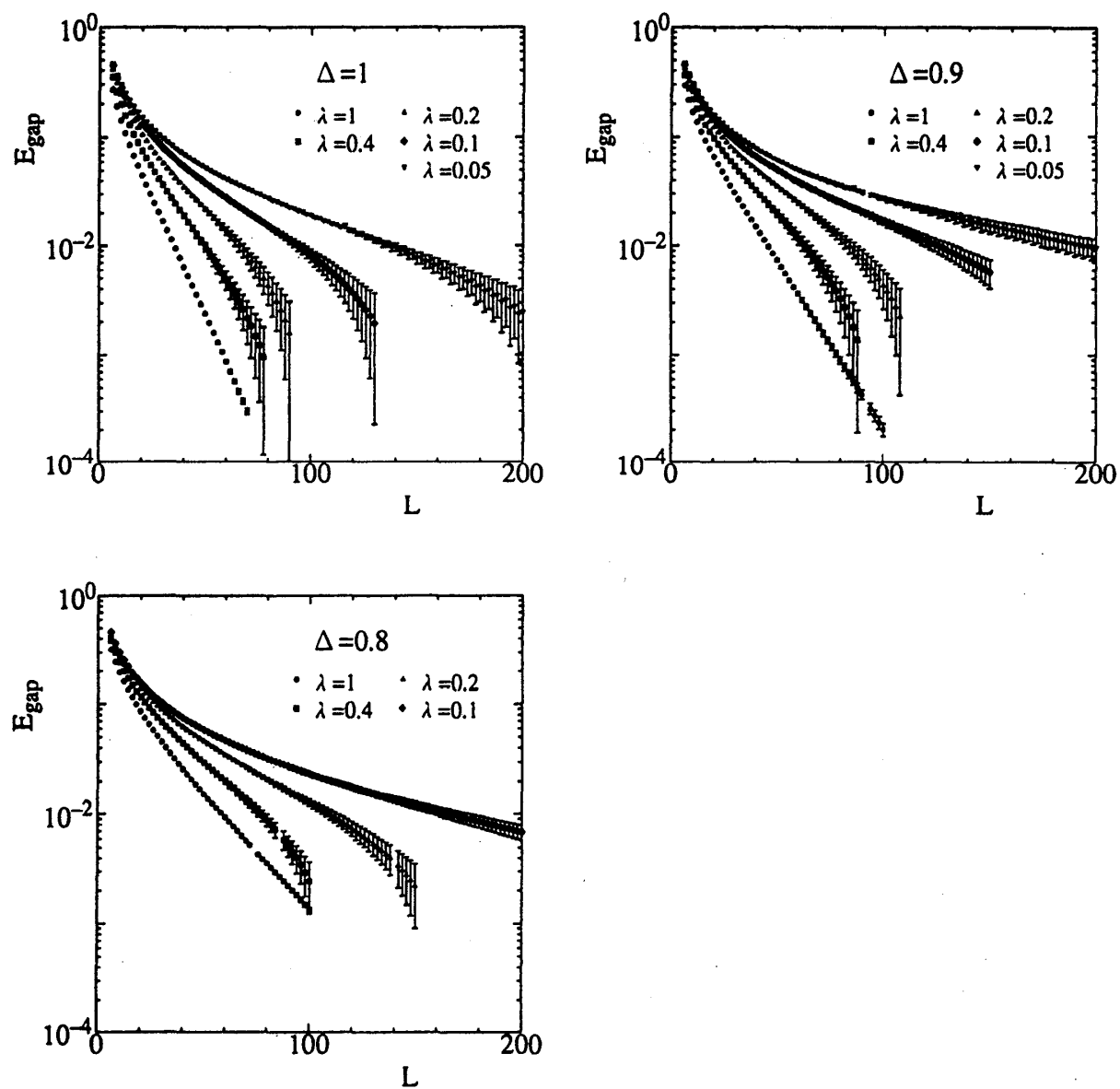


図 3.17: m で外挿したギャップ $E_{\text{gap}} = E_1(S^z = 0) - E_0(S^z = 0)$ を長さ L に対してプロットしたもの。この傾きから相関長 $\xi(\Delta, \lambda)$ を決める。

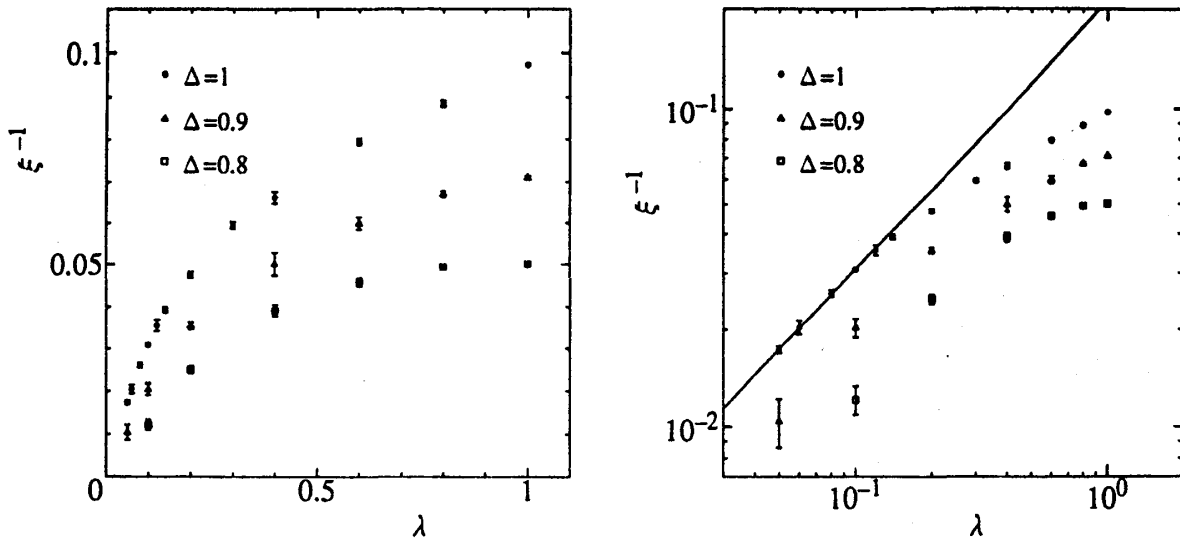


図 3.18: 逆相関長 ξ^{-1} の λ 依存性。

3点を用いると $\eta = 0.87 \pm 0.07$ となる。従って、より λ の小さい領域では指数はやや大きくなる可能性もある。異方性を入れたときについては、 λ の小さいところでの m の外挿ができなかったためよく分からなかった。

3.4.3 基底状態の相図

密度行列繰り込み群によるエネルギー・ギャップの計算から、Haldane 相と AF 相の間の臨界点は $\lambda=1$ のとき、 $\Delta_c(\lambda=1) \sim 1.15$ という値を得た。一方、 $\Delta=1$ のとき $S=1$ の Haldane ギャップと本質的に同等なエネルギー・ギャップは少なくとも $\lambda \geq 0.1$ まで続いている。 $L \rightarrow \infty$ で基底状態に 4 重縮退するエネルギー・ギャップから、有限サイズ効果を考へて評価した逆相関長はエネルギー・ギャップに比例すると考えられているが、 $\Delta=1$ のときはこのことが確認された。 $\Delta=1, 0.9, 0.8$ について逆相関長を求めたところ、転移は KT 的でなく 2 次転移のようである。 $\Delta=1$ のときの臨界指数は $\Delta=1$ のとき λ の小さい方から 4 点を用いると $\eta = 0.83 \pm 0.04$ 、3 点を用いると $\eta = 0.87 \pm 0.07$ という値が得られた。

さらに、 $\Delta=1, 0.9, 0.8$ のとき転移がベキ的に振舞うということは、 $\Delta > 0, \lambda > 0$ の領域では図 3.9 に見られるような 2 次元的な広がりを持つ massless の XY 相の領域は存在せず、 $\Delta \leq 1$ のとき Haldane 相が $\lambda > 0$ ($\lambda_c = 0$) で存在することを示唆しているが、 $\lambda_c(\Delta) \neq 0$ となるのが $\Delta=1$ であるかについては未定である。渡辺-野村-高田や Strong-Millis によるスケリング解析の結果と合わせると、結局、図 3.19 のような相図が考えられる。

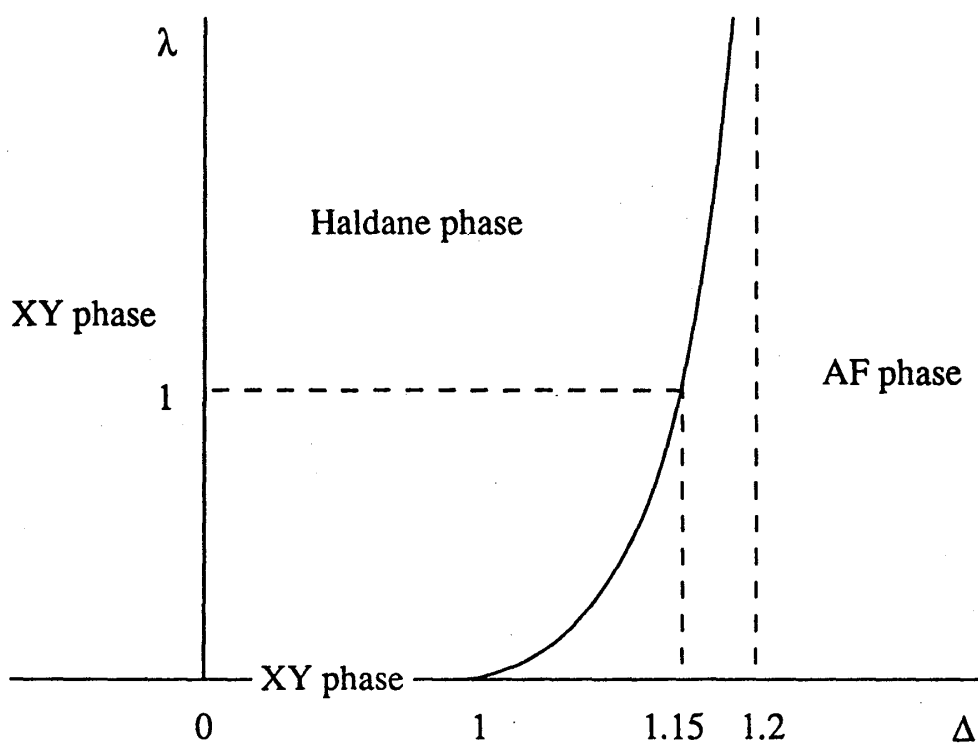


図 3.19: Δ - λ の相図。

4 結論

本論文では、2本の異方性 Δ を持つ $S = 1/2$ XXZ 鎖を鎖間相互作用 $-\lambda$ でつないだ $S = 1/2$ Heisenberg 梯子模型を調べた。この模型は $\lambda \rightarrow \infty$ で $S = 1$ XXZ 鎖になるが、 $\lambda = 1$ でも本質的に $S = 1$ の Haldane ギャップと本質的に同等のエネルギー・ギャップを持つことが分かっている。このようなエネルギー・ギャップが λ の小さいところまで残るのか、これまでにいくつか数値的に調べられてきたが系のサイズが小さすぎて明確な結論が得られていない。そこで最近、White によって提案された密度行列繰り込み群により大きな系の低励起状態を調べた。

密度行列繰り込み群の特徴は基底の truncation の方法にある。従来の実空間数値繰り込み群では系 (block) を 2 個つなげて新しい block をつくり、それを表現する基底は低エネルギーの状態から選んでいた。一方、密度行列繰り込み群では block を含むより大きな系 (superblock) を考え、その基底状態から block について既約した密度行列をつくり、密度行列の固有値の大きい状態に対応する基底を選ぶ。このような truncation の方法の変更により、従来とは比較にならない精度が得られるようになった。

この方法を $S = 1/2$ Heisenberg 梯子模型に応用し、Haldane 状態に特有の edge spin を得ることができた。またエネルギー・ギャップを求めることにより $\lambda = 1$ のとき Haldane 相と AF 相の間の臨界点を $\Delta_c(\lambda = 1) \approx 1.15$ と求めた。また $\Delta = 1$ で λ を小さくしたときに、Haldane 相と XY 相の間の臨界的な振舞いは 2 次転移のようである。さらに有限サイズ効果を考え、 $L \rightarrow \infty$ で 4 重縮退するエネルギー・ギャップから逆相関長を求めた。これはエネルギー・ギャップに比例すると考えられているが、 $\Delta = 1$ のときにこのことが確認できた。 $\Delta = 1, 0.9, 0.8$ については逆相関長の振舞いから $\lambda_c \sim 0$ であり、特に $\Delta = 1$ のときの臨界指数は、 λ の小さい方から 4 点を用いると $\eta = 0.83 \pm 0.04$ 、3 点を用いると $\eta = 0.87 \pm 0.07$ という値が得られた。 λ の小さいときの臨界的な振舞いが 2 次転移であることは、 $\Delta > 0, \lambda > 0$ においては massless の XY 相が $\lambda = 0$ の線上にしか存在しないことを示唆している。

謝辞

本論文は高田慧教授の指導のもとにまとめられたものである。高田慧教授には大変興味深い研究課題、適切な研究の指針を与えていただきました。また Haldane 系をはじめとする量子スピン系にとどまらず、様々な物理について解説していただき、大変お世話になりました。心より感謝致します。密度行列繰り込み群のプログラムを完成させるにあたっては、久保健教授、中村統太博士にしばしば長い時間、相談に応じていただきました。さらに久保健教授には、しばしば筆者の浅学な部分を補っていただきました。本当にありがとうございます。また、物性理論グループの先生方や院生の方々には物理に関する問題、数値計算に関する問題など様々な質問に快く応じていただき心から感謝しております。

参考文献

- [1] 田崎晴明：固体物理 27 (1992) 1；勝又紘一：固体物理 27 (1992) 9
- [2] I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb, and H. Tasaki: Phys. Rev. Lett. 59 (1987) 799
- [3] M. den Nijs and K. Rommelse: Phys. Rev. B 40 (1989) 4709
- [4] H. Tasaki: Phys. Rev. Lett. 66 (1991) 798
- [5] T. Kennedy and H. Tasaki: Phys. Rev. Lett. 45 (1992) 304
- [6] S. Takada and K. Kubo: J. Phys. Soc. Jpn. 60 (1991) 4026
- [7] S. Takada: J. Phys. Soc. Jpn. 61 (1992) 428
- [8] S. Takada and H. Watanabe: J. Phys. Soc. Jpn. 61 (1992) 39
- [9] K. Hida and S. Takada: J. Phys. Soc. Jpn. 61 (1992) 1879
- [10] T. Kennedy: J. Phys. Condens. Matter 2 (1990) 5737
- [11] S. Miyashita and S. Yamamoto: Phys. Rev. B 48 (1993) 913; J. Phys. Soc. Jpn. 62 (1993) 1459
- [12] S. R. White and D. A. Huse: Phys. Rev. B 48 (1993) 3844
- [13] S. R. White: Phys. Rev. Lett. 69 (1992) 2863; Phys. Rev. B 48 (1993) 10345
- [14] R. M. Noack, S. R. White, and D. J. Scalapino: preprint (cond-mat.9404100)
- [15] J. W. Bray and S. T. Chui: Phys. Rev. B 19 (1979) 4876
- [16] T. Xiang and G. A. Gehring: J. Magn. Magn. Mater. 104-107 (1992) 861
- [17] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, and W. T. Vetterling: *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing* (Cambridge University Press, New York, 1988) [丹慶勝市, 奥村晴彦, 佐藤俊郎, 小林誠 訳: NUMERICAL RECIPES in C (技術評論社, 1993)]
- [18] D. C. Johnston, J. W. Johnson, D. P. Goshorn, and A. Jacobson: Phys. Rev. B 35 (1987) 219
- [19] R. S. Eccleston, T. Barns, J. Brody, and J. W. Johnson: Phys. Rev. Lett. 73 (1994) 2626

- [20] K. Ishida, Y. Kitaoka, K. Asayama, M. Azuma, Z. Hiroi, and M. Takano: J. Phys. Soc. Jpn. **63** (1994) 3222; Z. Hiroi, M. Azuma, M. Takano, and Y. Bando: J. Solid State Chem. **95** (1992) 3370
- [21] T. M. Rice, S. Gopalan, and M. Sigrist: Europhys. Lett. **23** (1993) 445; S. Gopalan, T. M. Rice, and M. Sigrist: Phys. Rev. B **49** (1994) 8901; M. Sigrist, T. M. Rice, and F. C. Zhang: Phys. Rev. B **49** (1994) 12058
- [22] T. Barnes and J. Riera: Phys. Rev. B **50** (1994) 6817;
- [23] T. Barnes, E. Dagotto, J. Riera, and E. S. Swanson: Phys. Rev. B **47** (1993) 3196
- [24] E. Dagotto, J. Riera, and D. Scalapino: Phys. Rev. B **45** (1992) 5744
- [25] S. R. White, R. M. Noack, and D. J. Scalapino: Phys. Rev. Lett. **73** (1994) 886
- [26] H. Watanabe: preprint (1994)
- [27] R. M. Noack, S. R. White, and D. J. Scalapino: Phys. Rev. Lett. **73** (1994) 882
- [28] R. M. Noack, S. R. White, and D. J. Scalapino: preprint (cond-mat.9409065)
- [29] T. Sakai and M. Takahashi: J. Phys. Soc. Jpn. **59** (1990) 2688; K. Nomura: Phys. Rev. B **40** (1989) 9142; G. Gómez-Santos: Phys. Rev. Lett. **63** (1989) 790; N. Hatano: Phys. Lett. A **185** (1994) 46
- [30] K. Hida: J. Phys. Soc. Jpn. **60** (1991) 1347
- [31] K. Hida: J. Phys. Soc. Jpn. **60** (1991) 1939
- [32] H. Watanabe, K. Nomura, and S. Takada: J. Phys. Soc. Jpn. **62** (1993) 2845
- [33] S. P. Strong and A. J. Millis: Phys. Rev. Lett. **69** (1992) 2419; Phys. Rev. B **50** (1994) 9911
- [34] H. Watanabe: Phys. Rev. B **50** (1994) 13442